

材料问题物理模型的建立*

M. F. Ashby

[英国]剑桥大学工程学系

提要 本文描述了材料加工和材料工程性能的建模方法。描述了建立模型的流程图，讨论了与模型各部分之间耦合有关的问题。评述了各种建模技术，特别强调了内部状态变量法和机理图的构造。

1 引言

模型是一种理想化。模型与实际问题的关系类似于伦敦地铁地图与实际地铁系统的关系：它是一种粗略的简化，但抓住了某些本质。地铁地图扭曲地绘出各个距离和方向，但精致地表现出它们的相互联结情况。因此，为了抓住事物的本质而泰然自若地扭曲非本质的东西，这正是一切成功模型所具备的。最差的模型是一堆数据的简单描述；最好的模型能抓住问题的物理本质，它阐明能突出关键性观察结果的那些原理并且能预测在尚未被研究过的条件下将发生的行为。

模型种类很多。首先，区分**经验模型**和**物理模型**是有益的。经验模型是对一系列实验数据的近似数学拟合，没有预测能力。物理模型的基础是已经建立的物理和化学定律或原理，根据这些定律或原理，物理模型获得了预测能力。最终的目的还是物理模型。然而，材料问题很复杂：完全用物理处理是不可能的。于是，目标是建立物理框架，在这框架内嵌入某些变量行为的经验描述。对此，已有大家公认的一些先例。例如，弹性体的建模(modelling)是基于平衡和协调的物理原理，而当应变较小时，则是基于线性弹性变形的原理。弹性模量的数目与数值以及弹性模量与温度及压力的依赖关系尚不能从物理原理中导出具有实用精度的结果，而必须以经验方法引入。热激活化学动力学的建模采用 Arrhenius 定律，而以统计力学为基础。这种建模过程中涉及的激活能，有时可以由分子模型预测出具有实用精度的结果；但其预设的指数的数值无法用目前的建模方法得出——它也必须用经验方法引入。其他类似情况还有很多。

区分**静态模型**和**动态模型**也是有益的。静态模型是指模型中的参数不随时间而变；具有含时效应(time dependent effects)的模型则是动态模型。人们感兴趣的材料行为常常是动态的。对于这种情况，重要的是搞清楚含时性的来源：最常见的来自动力学过程(kine-

* 作者M. F. Ashby及出版者K. Wakelam惠允译成中文在本刊发表，特致谢意。——编者

tics) (如粘性或扩散, 或化学反应速率), 或来自热流或来自惯性。

模型的目的是什么? 这是一个重要问题。其答案大大影响着模型建立的方式。有这么一些例子: 目的是为了了解和洞察材料某方面行为的物理本质; 获得方程或程序 (如有限元程序中的塑性力学方程) 中材料的某些响应; 预测实验室中不易复制条件下 (地幔中的流动也许就是例子) 材料的响应; 允许对时间、空间或速率进行外推 (核废料储存的安全性); 浓缩数据 (各种弹性常数是应力应变数据的浓缩; 各种扩散常数是扩散数据的浓缩); 指导工艺的优化或提供工艺的实时控制 (化学工程师已成功加以应用); 指导工程设计中材料的优选和使用。

材料的文献里有很多模型。然而, 关于如何建立模型的文献却很有限。在数学和化学工程方面的一些著作^[1-3]中有一些简介。具体报道材料问题的则分散在各种文献^[4-11]中。笔者试图将这些内容吸收到流程图内, 并吸收到以下章节的讨论中去, 这些章节概述了建立适用于材料问题的物理模型 (根据需要带有一些经验成分) 的步骤。这些步骤是通过分析业已用于建立某些类型材料问题模型的那些方法得出的, 但对其他类型问题可能并不适用; 如果是这样, 读者也许应将其加以扩展和综合推广。本文仅起抛砖引玉的作用。

2 建立物理模型

流程图 (图 1) 概括了建立模型的步骤。并非所有问题都需要所有的步骤。此流程图是一个清单, 有助于指导思考和规划: 其步骤如下所述 (方框序号参见图 1)。

2.1 问题 识别问题及其背景 (方框 1) 似乎是轻而易举的, 有时也确实如此; 但是往往一个问题包含着若干个子问题。有时会涉及多种机理。析出物的增长可以受扩散控制, 也可以受界面动力学控制; 一个承载的柱体可能发生弹性变形, 可能发生屈曲, 可能发生塑性破坏或通过各种类型的蠕变而失效。分别建立每个子问题的模型, 然后将结果进行对照或结合, 这是比较简单的——尽管这些子问题模型建立后的耦合方法是真正的难题 (见 2.5 节“模型”)。如果问题是存在已久的, 就会有一个与其有关的唯象理论——经验、数据、依赖关系图; 找出这个唯象理论将有助于在建立模型时检验模型。如果是一个新问题, 则可能不存在这样的唯象理论; 于是也许有必要通过进行实验来产生它。因此, 首先应了解问题的本质以及与问题有关的资料或“民间传说”。

2.2 输入与输出 据说爱因斯坦 (Albert Einstein) 曾经说过: “模型应当尽可能简单, 而不是比较简单”。建立模型的实质是简化, 但必须不失本质要素。建立模型的一个重要步骤是识别输入和输出 (方框 2)。你想从模型中得出什么? 你希望输入什么信息? 宏观变量和边界条件 (成份、温度、时间、载荷、位移, 等等) 是什么? 如果某个变量 (如温度) 几乎不变或者如果有变化也几乎没有什么影响, 那就可以先将该变量去掉, 可以在以后再加入。

当多个模型耦合时, 某个模型的输出可能成为下一个模型的输入。耦合问题将在 2.5 节“模型”中进行更详尽的讨论。

2.3 机理 我们这里关心的是物理模型, 或至少是具有物理成份的模型。于是, 模型的核心就是物理机理 (方框 3)。这些物理机理最好通过直接的实验观察来确定 (方框 3.1); 次好则是根据间接观察来推出机理。例如, 控制从固溶体中析出的机理可直接通过透射电镜和显微分析来识别, 或者通过电阻率变化来推断。一个承载柱体的弹性屈曲可通过直接观察

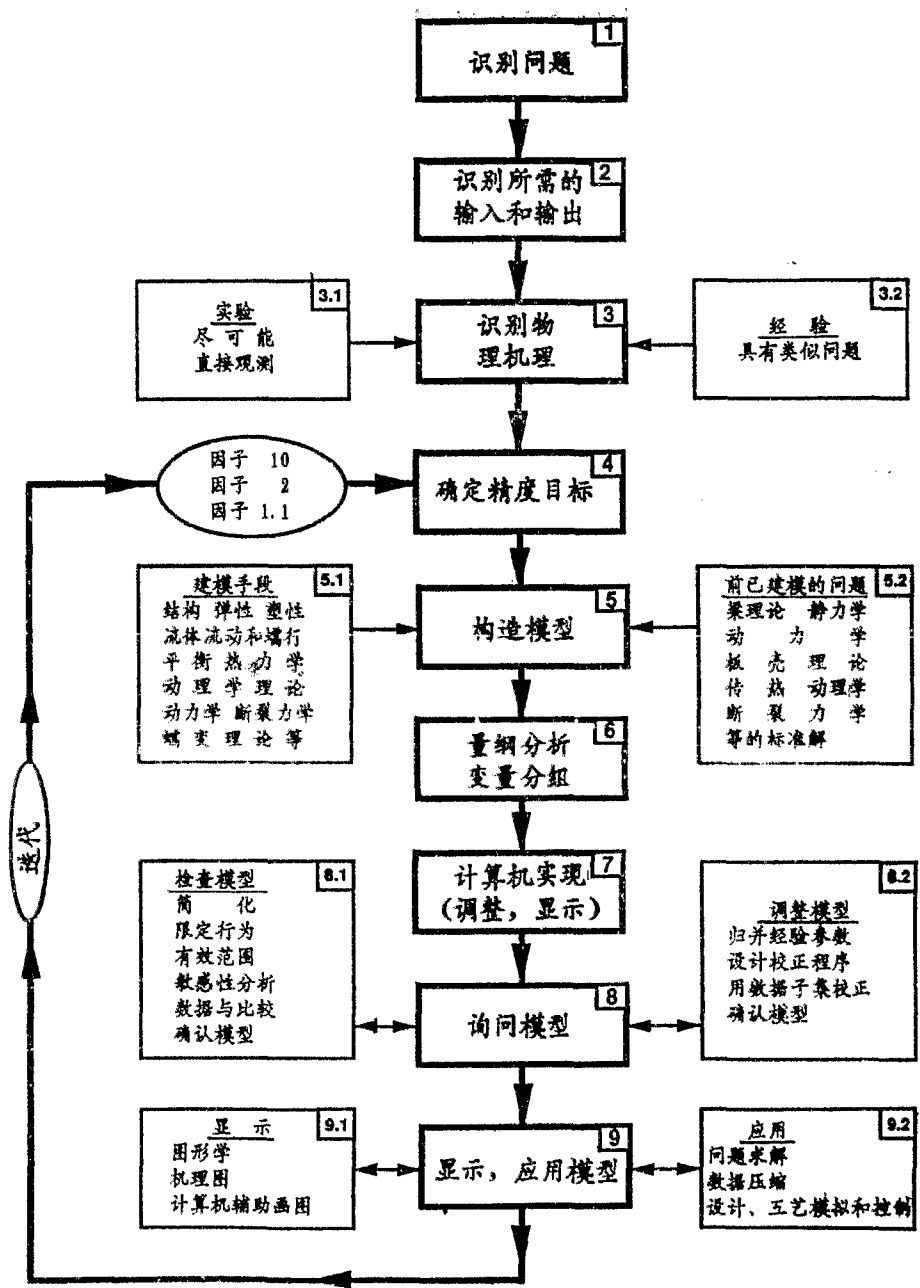


图1 说明构造物理模型时各步骤的流程图，每个步骤均可能需要反复迭代回前面的有关步骤

它受力时的形状和记下卸载时它的变形恢复来识别，也可根据力与位移的关系曲线推出。往往这个问题与已经遇到过的某个其他问题十分相似，于是这个问题的机理就可猜测出来（方框 3.2），例如析出物的长大通常受扩散控制，受压细长柱易于屈曲。但是在没有证据表明一种机理实际上在起作用，并且是，或者可能是起支配作用（指这种机理比相竞争的其他机理的影响更大）的情况下，假设这种机理是危险的。直接的观察是最好的。

2.4 精度 下一步是**确定精度目标**（方框 4）。建立模型最好看成是一个反复迭代的

过程。以1个数量级模型开始并非无道理，“方框图返回”计算的目的在于预测仅在因子10范围内的输出：它将识别出重要的变量并揭示出那些错误的物理假设。精度因子的明确表述对简化模型的重要过程是有帮助的：对输出的影响比该因子小的任何因素都可以忽略。在这个数量级水平上，大多数3维问题可用1维或2维的等效问题来近似，复杂形状可用简单形状来近似，材料性能哪怕有点变化，也可视为常数，于是就无需使用那些大型计算机——它们其实是一个障碍。整个建模过程首先是在这个数量级水平上进行，然后在因子2的水平上，再（如果需要的话）取因子为1.1，如此下去。在每一个水平上，都有必要问一下在前一阶段忽略了问题的哪些方面，它们在当前阶段是否需要考虑进去。然而好的策略是继续排除对结果的影响小于当前精度目标的那些方面：即使你知道怎样把它们包括进来，这样做也会导致不必要的复杂化。在某些问题中，精度可能受计算能力的限制：模拟常常因此受限制。正因为利用计算机能力方面确实存在着陷阱，因此应避免它。（在建模中）简单性是一个优点。

2.5 模型 模型是一种转换函数：它可将输入转换成输出。它的形式可以是代数方程、微分方程或积分方程，并且可以将这些方程置入离散计算中（例如，有限元计算或原子论计算）。所研究的问题未必需要一种根本上新的物理原理，未必需要一种过去从未遇到过的物理原理（例如高温超导或冷聚变）。因此，对于**构造模型**（方框5），利用最多的是标准技术和标准结果。有一些工程学和材料科学的**建模手段**（方框5.1），包括力学、热力学、动理学以及原子键和原子结构等等的方程和原理——这些都是工程物理学课程讲授的内容。但是求解问题往往不需要从最初的一些原理开始，而可以利用大量已被确认的模型，这里称之为**前已建模的问题**（方框5.2）。它们包括梁和柱理论的成果，一系列理想化的热流和输运问题的解，以及位错力学、断裂力学、接触力学、热力学等方面的成果。要问的问题是：你以前是否看到过与上述相同但形式略有不同的问题？这种型式的有关问题以前是否已经解决了？能否将这个问题重新描述为一个已经解决的类似问题？审查一下类似问题以前建立模型的方法，你能够使用同样的方法吗？其结果能否适合于你的目的？这样建模可能涉及用较简单的几何形状来近似真实几何形状，用较高级别的对称性设计来代替非对称设计，以及其他诸如此类的理想化措施；但这样做所引入的误差通常是可估算的，并且如果它小于精度目标，则是无害的。物理模型的首要目的，是以力学、热力学、动理学理论等的原理为基础来描述机理。如果过程的某部分无法建立模型，则引入经验式来与实验数据相拟合（唯象理论），比如一个幂律式，但是这么做，从某方面来讲要允许一旦具备更好的模型时，要很容易用这模型来代替。建模手段在一些标准教科书中可以找到。前已建模的问题的总目录则比较难以找到；其中一些已列在参考文献中（如[12]和[13]）。

这些建模手段提供一个初始的数量级或“问题范围”的计算，并且它们往往可以做得好得多。但是材料行为常常涉及4个更复杂的层次：**结构演化、多种机理、耦合过程和空间变化**。

结构演化确切地说是材料的结构并因而是其行为随时间的演化。当材料变形时，会生成内部空洞或裂纹；这种“损伤”削弱了材料，从而增大了材料中形成损伤的速率：这是正反馈。当晶体粉末通过烧结或热压而压实时，晶粒会长大；晶粒长大使烧结速率减慢，而较慢的烧结则使晶粒长大速率减小：这是负反馈。采用内部状态变量法能够最好地导出描述这类

行为的本构模型。

简言之，关键思想是如下这些^[5]。一个本构模型是一组数学方程，它们描述了承受诸

如应力、温度、电场或磁场、辐射等外界影响时材料单元的行为。本构模型有两种形式：响应方程和结构演化方程。以变形过程中伴有空洞和裂纹的形成为例(图2a)，响应方程描述了现行应变率 $\dot{\epsilon}$ 与应力 σ ，温度 T ，以及内部状态变量 D 的现行值(对于“损伤”，用空洞的面积分数来度量)之间的关系。 D 描述了结构的现行状态^[15]。于是有

$$\dot{\epsilon} = f(\sigma, T, D, \text{材料性能}) \quad (1a)$$

状态变量 D 随损伤增长而演化。结构演化用下式表达：

$$\dot{D} = g(\sigma, T, D, \text{材料性能}) \quad (1b)$$

式中 f 和 g 为函数，上加圆点表示对时间的微分。将这两个方程作为联立方程积分可得出应变-时间响应曲线。具体作法是取初值 $\epsilon = 0, D = 0$ ，定时间步长，计算增量，于是得出 ϵ 和 D 的现行值，再用这些值计算下一步 ϵ 和 D 的变化，其计算结果示意地绘在图2b上。

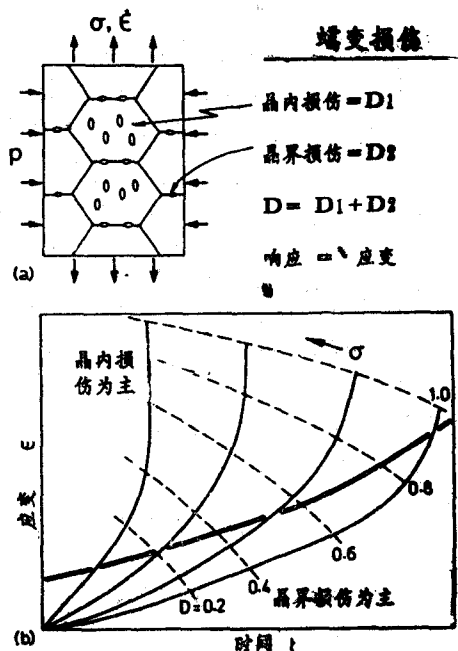


图2 结构演化：伴有空洞和裂纹形成的变形^[14]

(a) 在晶粒内和晶界上具有空洞损伤的蠕变固体——状态变量度量损伤的程度。(b) 给定 T 和 σ ，历史时的响应曲线(标明了主导机理)

常常有几种机理同时对响应起作用。塑性应变可以来自位错机理，也可以来自扩散机理^[16]。应变率是这两种作用的总和(图3a)。响应曲线仍然是应变率 $\dot{\epsilon}$ ，它是现行应力和下面两个状态变量的函数：现行位错密度 ρ (描述加工硬化和回复)和现行晶粒尺寸 g (确定扩散机理的速率)。于是本构方程取以下形式：

机理

位错 扩散
塑性 流动

$$\text{响应曲线: } \dot{\epsilon} = f_1(\sigma, T, \rho) + f_2(\sigma, T, g) \quad (2a)$$

$$\text{状态变量: } \begin{cases} \dot{\rho} = g_1(\sigma, T, \rho, g) \\ \dot{g} = g_2(\sigma, T, \rho, g) \end{cases} \quad (2b) \quad (2c)$$

式中 T 为温度， f_1, f_2, g_1 和 g_2 为函数(详见[16])。动态(与时间相关)塑性响应曲线如前一样可以将上述方程作为联立方程组进行积分得出。定常响应曲线常常是感兴趣的，已通过令 $\dot{\rho}$ 和 \dot{g} 等于零，解出 ρ 和 g ，然后将结果代入式(2a)而得出。示意图3b给出了显示定常态响应曲线的一种方法。用于塑性流动建模的内部状态变量法有几种变式，可参见[5,17—19]。

可以采用类似方式处理加工问题。粉末热压制(图4)受到来自屈服、幂律蠕变和来自

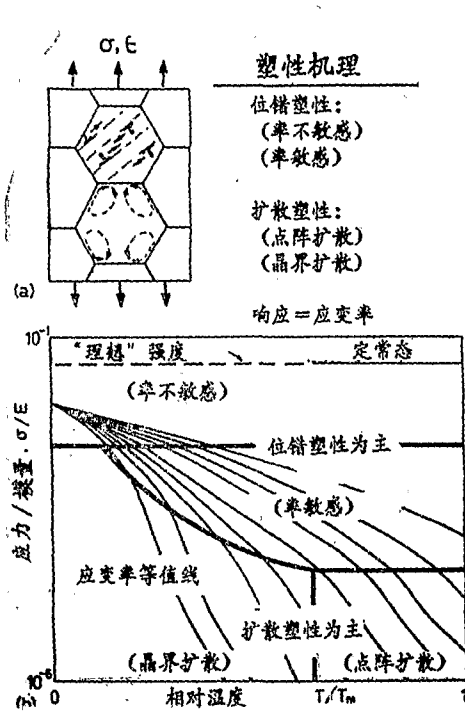


图3 结构演化中的塑性机理

(a) 通过位错运动和扩散进行的多晶体变形——状态变量是位错密度和晶粒尺寸。(b) 在给定应力和温度下，定常态响应曲线 ϵ_{ss} 。

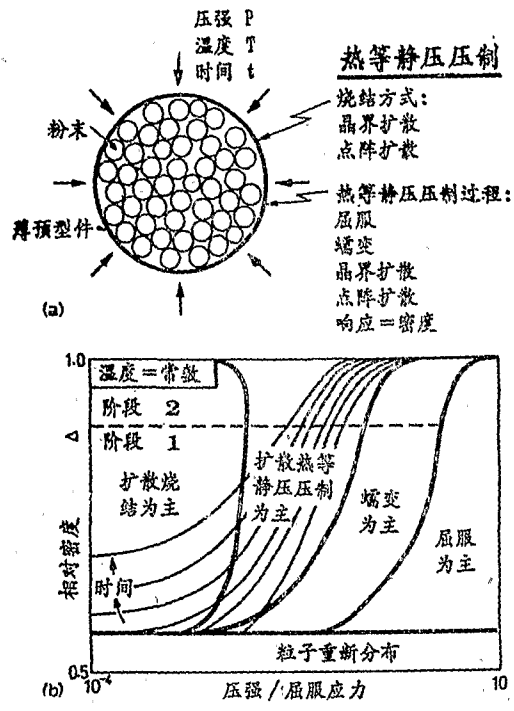


图4 工艺建模：热等静压制^[20]

(a) 用热等静压制来压实粉末——状态变量是密度和晶粒尺寸。(b) 给定温度和压强的历史时，起作用的各种机理的示意图——可加入晶粒尺寸

各类扩散的作用；烧结速率是这些作用的总和^[20]。晶粒长大通过孔隙与晶界分离而影响烧结，其状态变量是现行密度 Δ （它度量残留孔洞的体积分数）和晶粒尺寸 g 。这种响应曲线——模型的目标——仍为 Δ ；它也是一个状态变量。烧结本构模型的一般形式为

机理

$$\text{状态变量} \begin{cases} \dot{\Delta} = f_1(\Delta, T, g) + f_2(\Delta, T, g) + f_3(\Delta, T, g) & (3a) \\ \dot{g} = g_1(\Delta, T, g) & (3b) \end{cases}$$

式中 $\dot{\Delta}$ 是密度变化速率， \dot{g} 是晶粒长大速率。给出了对 Δ 的3种作用，它们分别来自3种独立机理。如前所述将微分方程作为联立方程组进行积分。

化学工程师们业已广泛采用内部状态变量法来建立气体和液体中的化学反应模型。这种方法用于固体材料，首先是用来建立蠕变断裂的本构模型^[16]；类似的方法已经用来建立延性断裂^[21,22]和其他类似问题^[23-26]的模型。其他成功的应用包括建立复合材料刚性损失的模型^[27]（图5）；建立由于多重开裂而导致的脆性固体的裂碎模型^[28-30]；建立热轧和锻造^[31,32]以及时效硬化^[33]的模型（图6）。值得注意的是，这些模型可以十分出色地描述局部的材料响应，甚至在应力和时间的复杂历史条件下^[18]。

耦合过程示于图7—14。首先在微观层次上：向正在长大的析出物运动的溶质必须首先扩散，然后必须附着上去（图7），可以分别对这两种过程的动理学建立模型，但要保证流

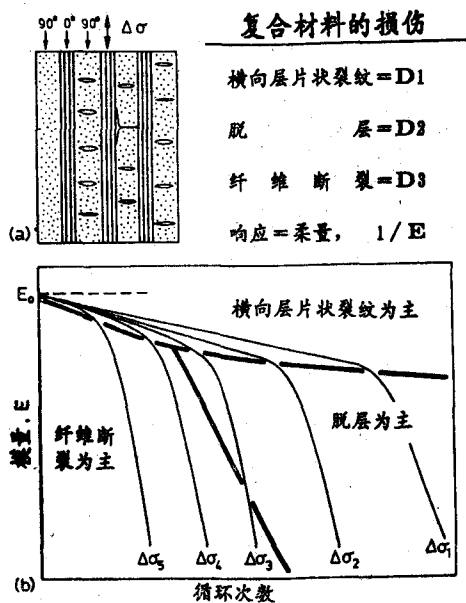


图5 复合材料中的损伤^[37]

(a) 疲劳后的复合材料, 含有横向层片状裂纹, 脱层和纤维断裂——状态变量度量这些损伤的程度。(b) 响应曲线, 标明了主导机理

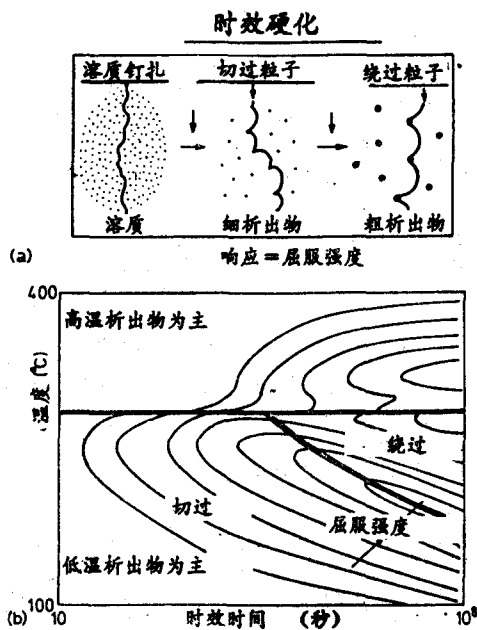


图6 合金的时效硬化^[38]

(a) 两种机理是: 切过粒子和绕过粒子——状态变量是析出物的体积分数和粒子尺寸, 响应曲线是硬度或屈服强度。(b) 时间-温度-相变 (TTT) 图

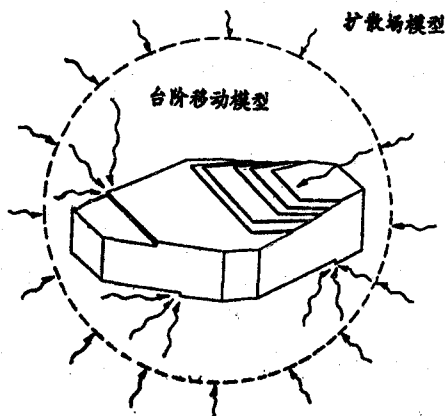


图7 析出物长大的耦合过程: 扩散使界面台阶长大的机理: 在模型之间的界面上扩散流量必须匹配 (据[34])

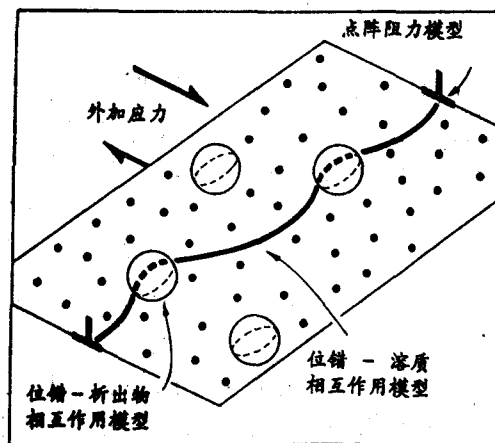


图8 位错运动受到点阵阻力、溶质和析出物联合作用的阻碍: 这些作用的耦合必须处处满足平衡性^[39]

量间的匹配; 这就必须涉及耦合模型。位错运动 (图8) 同时受点阵、溶质原子和析出物等的阻力所阻碍。一次只建立一种机理的模型而忽略其他机理几乎总是最简单的, 但必须注意在后来的耦合过程中要保证连续性和平衡性。宏观耦合的例子如图9—12所示。在焊接、粉末喷涂成形、连续浇铸和热轧 (分别见图9, 10, 11和12) 时, 对于过程各个部分的模型 (如图上所标明的) 必须以某种方式加以耦合, 这时要保证连续性、协调性和平衡性, 耦合有时

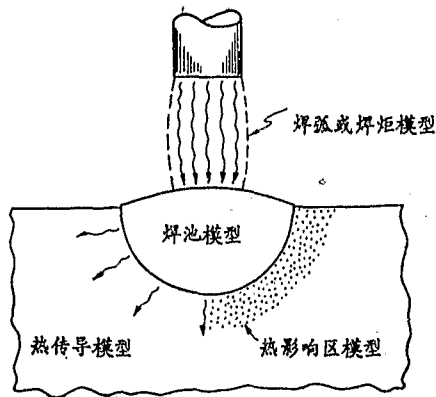


图9 在焊接中，焊弧或焊炬模型、焊池模型和热影响区模型都是耦合的：热流和温度必须在共用交界面上匹配

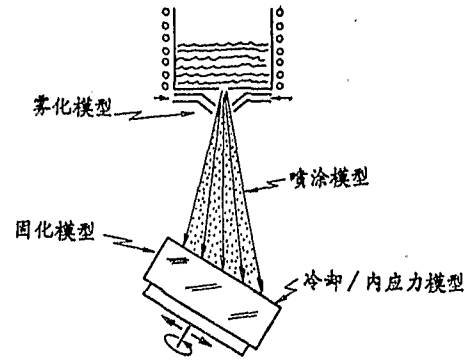


图10 在喷涂成形中，雾化模型、喷涂模型、冲撞模型、固化模型和最后的传热模型都是耦合的：材料和热流必须在它们相遇处匹配

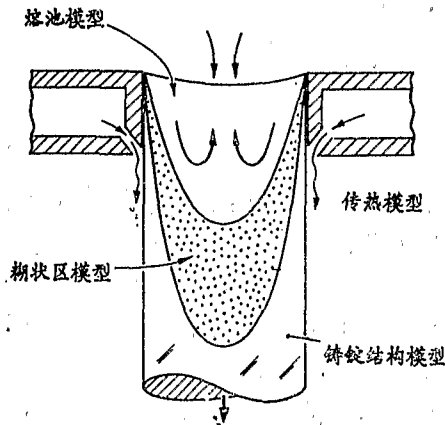


图11 在连续浇铸中，熔池模型、糊状区模型、固体模型和外界强迫冷却模型都是耦合的：热流和材料流必须匹配

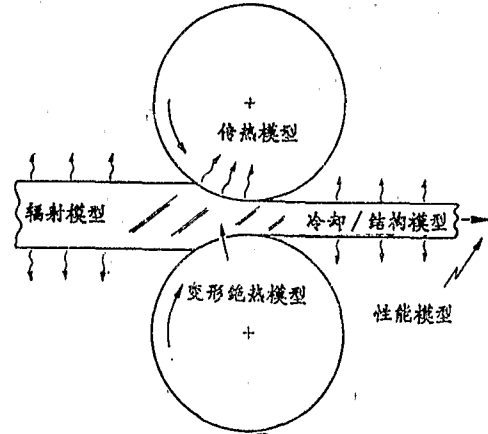


图12 热轧涉及热流和材料流的耦合：温度和变形影响轧辊压强和轧制板材的结构及性能（据[32]）

涉及尺度问题。建立点阵阻力的基本模型（图13）和断裂的基本模型（图14）所作的努力，是将位错核心区或裂纹尖端附近区域的原子模型结合到远场的连续介质描述中。这时模型也必须在它们相遇的边界处匹配。当耦合的各部分之间无反馈时，各个部分都可以用来自另一些部分的恒量输入来分别建立模型。当有反馈时，建立模型必须包括这种反馈，于是问题可能变得复杂化，有时需要用迭代的方法求解。耦合本身包括表面本构方程。固-固接触需要传热方程和摩擦方程；固/气界面需要发射率方程和吸收率方程，如此等等。人们对这些材料性能（传热系数，摩擦系数等）往往了解很少并且没有很好给以表征。

需要对不同尺度的耦合再进行一点讨论。从原子核经过原子、位错、亚结构和晶粒等尺度到宏观尺度，存在着各种等级的结构尺度（图15）。材料系统的宏观响应反映了宏观以下各级结构的响应。例如，梁的承载拉长了原子键，从而改变了电子能级；正是这个产生了弹性回复力。如果载荷足够大，就会使位错发生运动和增殖；位错运动造成塑性弯曲，大塑性变形使晶粒发生转动，改变位错滑移面上的应力，从而改变位错的运动方式。在各等级之间存在着反馈。

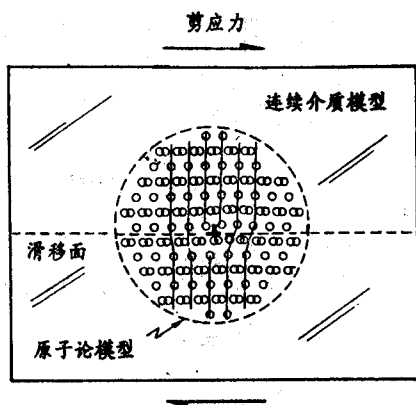


图 13 位错运动的点阵阻力模型可以将位错核心的原子论描述与远场的连续介质描述连接起来：拉力和位移必须在边界处匹配 (据[36])

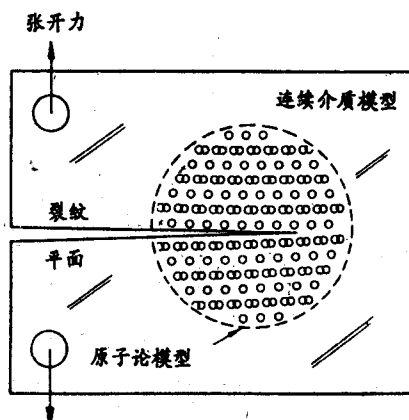


图 14 理想固体对裂纹扩展的阻力模型可以将裂纹尖端的原子论描述与远场的连续介质描述连接起来：拉力和位移必须在边界上匹配 (据 [36])

这种反馈通常是弱的^[11]。这允许用一个或几个可被转到下一个高的等级上去的参数来描述这一个级的行为。电子对变形的响应是通过材料的弹性常数反映出来的。弹性常数与变形仅有微弱的依赖关系；除了在图13中的位错最核心处或图14中的裂纹尖端处（这些地方应变非常大，只有在这里才需要考虑原子尺度）以外，它们可被假设为常数。位错群对应力的响应是通过屈服强度 σ 反映出来，位错群体随应变的演化是通过加工硬化系数反映出来。很少需要按照单个位错的行为来预测宏观响应，只有当所研究的长度尺度与位错间距（如图14的裂纹尖端处）相当时，才需要离散-位错模型。大塑性应变效应是通过织构反映出来，使其定量并不简单，但仍可把它看作为一组参数。几乎总是可以把在一个等级上的行为作为一个或多个参数或作为一个简单函数转到下一个更高的级上去。这种程序使各级之间的耦合简化为最简单的类型。

结构名称	尺度力	学
建筑物	10^1 m	结构力学
简单结构	10^2 m	损伤/断裂力学
组元	1 m	连续介质力学
晶粒	10^{-2} m	晶体塑性力学
位错群	10^{-4} m	细观力学
单个位错	10^{-6} m	位错力学
原子	10^{-8} m	原子论：点阵势
电子轨道	10^{-10} m	电子轨道力学
	10^{-12} m	
原子核	10^{-14} m	核物理
	10^{-16} m	

图 15 结构尺度的等级 (又见 [11]和[37])

空间变化出现在应力、温度、浓度或其他场变量是非均匀的时候。简单的几何形状可以采用方框5.1和5.2的建模手段用解析方法处理。较复杂的几何形状需要用离散方法，即把材料分成若干个单元或粒子，它们的每一个按照一个本构方程产生响应并与它的邻居相互作用，以保持连续性、协调性和平衡性。存在着从原子尺度到连续介质尺度的各级离散方法。这些方法将在附录中简要综述。

2.6 量纲 在建立模型过程中关键的一步是量纲分析 (方框 6)。量纲分析是另一种建

立模型的手段^[38,39]，但它是非常重要的一种，因此把它单独列出。有时单用量纲分析便可在某一个尺度上建立模型^[38,39]。即使不作这样的用途，它在检验方程和结果是否在量纲上一致以及在将模型的变量排列成无量纲数组这个阶段上仍是重要的。通常无量纲数组都比物理量少（Buckingham 定则），并且正是这些数组才是问题的真实变量；当评价或显示模型时，这些无量纲数组才是应当选择的正确坐标轴。对于指数、对数或幂律的自变量总是采用无量纲量——不这么做会使“常量”具有怪诞的令人吃惊的单位以及无法想象的物理意义。通常无量纲数常数和无量纲数组都是有意义的。

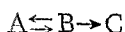
2.7 计算机实现 如前所述，符合实际的材料模型往往会十分复杂。复杂性曾一度是建立模型的主要障碍。计算机改变了这一切。借助于编写得很好的编码来实现模型（方框 7）可使模型得到更广泛的应用。有一些有专利权的程序包或软件包有助于实现内部状态变量模型（Stella 软件包是一个例子）和进行有限元计算（如 Abaqus 软件包）。具有用于 Monte Carlo 模拟和能量最小化原子计算的有效算法。在计算机能力仍然是有限的地方，可借助于目前已有的大型并行计算机。

计算机实现在模拟（simulation）过程中有特殊价值：通过将模拟真实事件的数据输入模型来研究已建模系统的动态响应。当对位错结构的自组织^[40]，枝晶的生长^[41]以及再结晶和晶粒长大的进程^[42]进行模拟时，这些事件揭示了复杂结构的演化方式。工艺模型模拟了诸如连续铸造或薄板压制等工艺的进行，这种模拟允许无需进行昂贵的实验就可以研究工艺变量改变时产生的效应。

2.8 询问 现在来检查、询问和确认模型（方框 8）。如果模型给出荒谬的结果，那就得否定它而重新开始。首先，检查每一步骤。它能否以较简单的方式导出？其物理基础和方程形式是否清楚？模型的预测能否用简单的物理术语来阐释？其次，询问模型。对于极端输入值，输出是否敏感？在它显然应该输入的条件下（例如输入值为零时），它是否简化为已知的较简单的结果？输出值对输入值的敏感程度如何？如果不敏感，那么这个输入值及其在模型中的作用能否用常数代替（方框 8.1）？这是一些用纯分析性模型可以做到的事情。但是许多模型（正如我们已经指出的）具有一种经验成份，这就需要更为巧妙的方法，这里称之为调整（方框 8.2）。一个经验性的原理将一些未知常数引入模型，有时则是好几个原理。它们常常只不过是相乘，在这种情况下，它们可以只包括一个或两个未知常数。（在此可借助于级数展开；在较低的精度目标下，将非线性函数予以线性化或甚至将它们近似为一些常数并不会丢失掉什么）。再次，设计一个校准步骤。含有一个常数的模型需要一个测量来调整它的值，含有两个常数的则需要两个测量。但是一些实验结果显示分散性，最好是用一种适当的方法把几个测量值进行平均。调整在实际上意味着：以某种有效的方式把模型的输出与实验结果进行比较，要包括尽可能多的输入值，同时用迭代方法来改进这些常数。敏感性分析提出下列顺序：首先要将常数调整到对输出影响最敏感。方框 8.1 和方框 8.2 各自都以“确认模型”这个词来结束。这意味着一系列的严格检测，此时其目的不是去改变模型而是确认用当前这种形式的模型来描述被建模的材料是多么之好。如果是恰当的，则模型几乎是完善的，否则还需另行迭代。

2.9 显示 几乎完美不等于十分完美。考虑人/模型接口是重要的：怎样使用模型和怎样显示结果（方框 9）。首先是显示（方框 9.1）；模型的最终利用取决于显示。建模的执

行结果可能很复杂，例如它可能是一组微分方程或大量的数据输出。这两者都没有真正解决问题，因为目的是查看和获得答案，而不仅仅是得知它的存在。这时合适的显示是有益的。例如状态变量法导致机理图的思想，它是一种通用的方法，可提供调整过的模型的计算结果和实验数据两者。这种思想最好用下面的例子来说明。作为一个一般性例子，考虑化学反应



式中的所有成份都溶于盛在某一容器中的溶剂里。A的浓度 C_A 是一个内部变量，B的浓度 C_B 也是如此。C的浓度由守恒定律来决定。这里共有两个内部状态变量。目标是建立A的分解模型：它在溶液中可以均匀分解而在容器内壁上则不均匀分解（具有不同的动力学），即有两种分解机理。A的分解速率等于正向反应速率（以上述两种机理进行）减去反向反应速率。B的变化速率取决于这两个速率减去C的分解速率。本构方程的形式为

机理

均匀 非均匀

$$\dot{C}_A = f_1(T, C_A, C_B) + f_2(T, C_A, C_B) \quad (4a)$$

$$\dot{C}_B = g_1(T, C_A, C_B) + g_2(T, C_A, C_B) \quad (4b)$$

式中 f_1, f_2, g_1 和 g_2 是取决于温度 T 的动理学函数。 \dot{C}_A 的方程也是响应方程，因为正是 C_A 是要预测的。对于温度 T 的设定历史(例如等温条件)，这些方程可作为一个联立方程组积分，得出

$$\text{状态变量} \begin{cases} C_A = h_1(T, t) & (5a) \\ C_B = h_2(T, t) & (5b) \end{cases}$$

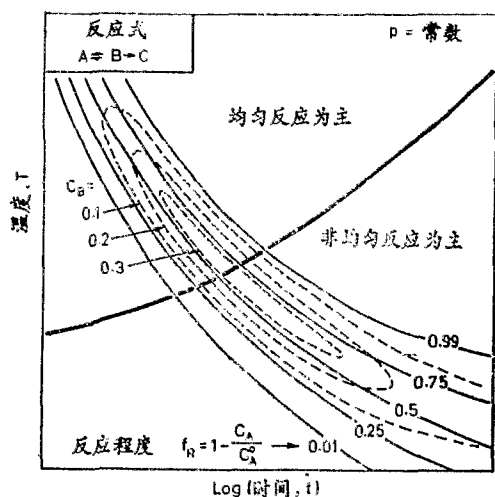


图 16 化学反应模型的响应曲线和机理图：它像冶金文献中所熟知的 TTT 图

现在可将结果表示成温度-时间相变 (TTT) 图，图上有附加的机理信息，如示意图16所示。在 T 和 t 坐标系中实线等值线示出 C_A 的响应曲线(用转变分数 $f_R = 1 - C_A/C_A^0$ 来度量，其中 C_A^0 为初始浓度)。粗实线将图分为两部分：在一个部分中，方程(4a)中均匀项起主要作用，意思是说在该区域内，它的反应速率大于非均匀反应速率；在另一个部分中，非均匀项起主导作用。因为已知第2个内部状态变量 C_B 也是 T 和 t 的函数，所以也把它加进去(虚线表示)。TTT曲线在冶金文献中是熟知的：它们概括了相变的动理学数据。它们通常由实验数据构成；但是随着模型的建立，可以把模型的预测添加进去；此种对比是调整和确认该模型的一种方法。TTT曲线是图形方法大家族中的一员，图2—6中的(b)图有所说明。变形机理图(图3)说明了显示具有多种机理的定常态响应行为的方法。损伤力学(图2和图5)监测呈空洞和裂纹形式的损伤，这种损伤随应变或循环次数而演化；该图显示了响应曲线(蠕变速率或刚度损失)，识别了机理，并展示了对于给定载荷历史条件下损伤的程度。工艺图(图4)展示了工艺的进程——

在图 4 情况下是粉末压实，图上标明了各工况下的主导机理^[43]。时效硬化图（图 6）类似于 TTT 曲线，但展示的不是相变的程度而是取决于相变程度的性能值——在图 6 情况为屈服强度^[33]。

这些技术使显示局部材料响应有了可能。当这些响应随位置而变化时，必须附加新的显示方法。用 2 维或 3 维图示法、固体建模、实时模拟，以及使用彩色，可以显示有限元（和其他空间变化）计算的输出。但最好是以某种较简单的，即使是近似的形式，使计算接近为一种代数表达式或一组规则来得到计算结果。

应用也需要考虑（方框 9.2）。最好的情况是，一个模型把问题的物理本质纳入数学形式之中：它不仅概括观察到什么事物，它还有助于理解，而且还能预测尚未观察到的行为。如引言中所述，模型有许多其他用途。数据压缩就是一种应用。工艺控制和优化是另一种应用。第三种应用是设计。如果一个模型打算实际应用，这时必须在形式上加以改写，以便使不理解该模型的工作人员可以使用它。事例研究，处理过的例子，以及书写完善和严格确证的软件在这里都是有益的。

最后（几乎是最后）还有逆问题。在工艺控制和设计中，模型是反向运行的，人们设定输出值，并寻找一些能获得该输出值的输入值。解析模型允许这样进行；模拟，即包含积分或平均的模型则可能不行。尺度耦合（见 2.5 节“模型”）尤其使反演困难，这是因为微观性能和结构的平均值要转到模型的宏观部分中，而当模型作反演时，信息将丢失而不能复得。当反演是目的时，必须将模型构造成能允许进行反演。

即使到这时这项工作尚未完结。流程图中的最后一个字是**迭代**。

3 结语和结论

建立模型看起来可能像艺术（其中确有艺术技巧），但至少在某程度上，可按照一系列步骤，例如像图 1 所示的那些步骤来建立模型。照此进行时，关键是：要确定模型用来做什么；识别基本物理过程；设定并保持一种恰好适合其任务的精度级别；具有作为建模手段的通常工程科学条件；认识并利用大量前已建模的问题；善于进行量纲分析；拥有适当的计算技巧和硬件；使用极限、界限、极值和常识来检验输出结果；要像重视模型本身那样重视使用模型者的需要。单靠数值计算的威力并不是通往成功模型的路径。得到正确的机理，简化，充分利用别人的建模经验及成果，至少都是同样重要的。

在材料文献中有许多成功的建模例子。分析时，许多建模工作都是按照图 1 流程图上概括的步骤进行的。当然，这些步骤并不是全部的规定；并非一切模型都需要所有这些步骤；对其他一些情况，也许可省去一些重要步骤。最好将流程图看作一张清单，如果按照它做，可以保证不会漏看一些显而易见的东西，可以保证把力量分配得更接近均衡。或许这张流程图还可提示此工作所需的各种技巧的组合。

附录 材料建模问题的离散单元方法

对应力、温度或浓度的空间变化的求解可能需要离散单元计算。

有限元法^[44,46]是一个例子。离散单元通过本构方程对温度、体力及应力等作出响应，在这些单元边界处要加上平衡性、协调性和连续性等约束。作为一种建模技术，有限元法已经得到很好的发展。其应用的难点常常在于描述一个单元的响应的本构方程。对本构定律的

内部状态变量的公式愈来愈多地纳入有限元计算中,以便得到空间变化行为的准确描述(例如[46])。

Monte Carlo 法通过结合已知的先验概率使有效能量最小化有了可能^[47]。例子是能量取决于位形的那些问题,如晶粒长大,位错微结构的演化,平衡原子或分子结构(晶界结构,偏聚等)的确定。通过假设系统的总内能呈 Boltzmann 分布,在原子层次上就包括了温度效应^[48]。这种方法的威力在于它是模拟(并可显示)涉及多体相互作用的结构变化的手段,在于寻找平衡位形的效率。这种类型的模拟可以揭示机理:粒子阻碍晶体生长的基本机理就是一个例子^[49]。应用在原子层次上,它们可以得出热力学量。

静态原子弛豫算法(static atom-relaxation calculations)容许引进材料原子尺度的离散结构。原子的相互作用用经验势来描述。Lennard-Jones, Buckingham, Coulomb 和 Tersoff 势是常用的经验势,它们可以有或没有附加的体积相关项^[47]。“嵌镶原子”法^[50]通过描述局域电子密度的一个“嵌镶”项把这些势结合起来。这种算法相当有效,可以处理高达百万个原子。这种方法在计算晶界和缺陷结构方面卓有成效^[51,52]。

分子动力学算法(molecular dynamic calculations)引入了点阵振动;原子-原子的相互作用(通过上述所列的某一种势)按照 Newton 定律使热能重新分布,加入热能使计算自由能和热力学性能(如热容)有了可能,使研究有限温度下结构的稳定性有了可能;但是这也引进了在静态计算中不存在的时间尺度,目前这妨碍了许多现象(例如扩散)的建模工作。本方法可用来建立界面偏聚模型,计算 Peierls 势垒和计算大于或等于 0°K 时的结构^[53]。目前的计算机技术把模拟器的计算时间限制为 1 μ s 左右。

从头开始算法(ab initio calculations)理论上只输入一个“材料”值,即原子数。用 Schrodinger 方程计算相互作用。化学家们长期感兴趣的这些方法目前被限于几十个原子的单元。各种经验修正(如伪势法^[54])加速了计算,从而能够研究更大的原子数目,但同时丢失了某些基本的东西。最精良的从头开始算法(如 Car-Parinello 法^[55])采用可加速计算的局域密度函数,可能包括了点阵动力学。从头开始算法使人们可以计算材料性能,如模量、热容和结构,而更重要的是可以计算微观常数如 Peierls 势垒强度和位形跳变频率。

参 考 文 献

1. G. POLYA: 'How to solve it; a new aspect of mathematical method'; 1945, Princeton, NJ, Princeton University Press.
2. J. M. HAMERSLEY: *Bull. IMA*, 1973, (9), 276 and (10), 368.
3. R. ARIS: *Chem. Eng. Educ.*, 1975, 10, 114.
4. G. DIFTR: 'Design, a materials approach', chapter 4; 1983, New York, McGraw-Hill.
5. O. RICHMOND: in 'Mathematical modelling of materials processing operations'; 1987, Warrendale, PA, TMS.
6. J. SZENTLY *et al.* (eds.): 'Mathematical modelling of materials processing operations'; 1987, Warrendale, PA, TMS.
7. J. SZEKELY: *Metall. Trans.*, 1988, 19B, 525.
8. J. W. EVANS and J. BRIMACOMBE: 'Mathematical and physical modelling of metals; processing'; 1989, New York, John Wiley.
9. M. F. ASHBY: in Proc. 10th Risø Conf. on 'Materials architecture', (ed. J. B. Bilde-Sorensen *et al.*), 1; 1989, Roskilde, Denmark, Risø National Laboratory.
10. J. SZEKELY: *J. Met.*, 1990, 42, 16-21.
11. U. F. KOCKS: in 'Modelling the deformation of crystalline solids', (eds. T. C. Lowe *et al.*); 1992, Warrendale, PA, TMS.
12. W. HUGHES and E. GAYLORD: 'Basic equations of engineering science'; 1964, New York, Schaum.
13. R. J. ROARK and W. C. YOUNG: 'Formulas for stress and strain', 5 edn; 1976, New York/London, McGraw-Hill.
14. A. C. F. COCKS and M. F. ASHBY: *Progr. Mater. Sci.*, 1982, 27, 182-244.
15. L. M. KACHANOV: *TV2 Akad. Nauk. SSR Otd. Techn. Nauk.*, 1958, 8, 1.

16. H. J. FROST and M. F. ASHBY: 'Deformation mechanism maps'; 1982, Oxford, Pergamon Press.
17. P. DUVAL and H. LEGAC: *J. Glaciol.*, 1980, 25, 151.
18. V. SAMPLE: in 'Reliable modelling of complex solids', (ed. T. C. LOWE *et al.*); 1992 Warrendale, PA, TMS.
19. Y. ESTRIN: in Proc. Conf. on 'High temperature constitutive modelling: theory and application', Atlanta, GA, ASME Winter Meeting, 1991.
20. A. S. HELLE, K. E. EASTERLING, and M. F. ASHBY: *Acta Metall.*, 1985, 26, 2163.
21. G. Le ROY, J. D. EMDURY, and M. F. ASHBY: *Acta Metall.*, 1981, 29, 1509.
22. O. RICHMOND: in Proc. Conf. 'Aluminium technology '86', (ed. T. Sheppard), 615; 1986, London, The Institute of Metals.
23. J. LEMAITRE and J.-L. CHABOCHE: *J. Appl. Mech.*, 1978, 2, 317-365.
24. J. LEMAITRE: *Nucl. Eng. Des.*, 1984, 80, 233-245.
25. J. LEMAITRE and D. MARQUIS: in 'Visco-plastic behaviour of new materials', (ed. D. Hull and T. J. Kozik) 53; 1989, New York, ASME.
26. J. LEMAITRE and J.-L. CHABOCHE: 'Mechanics of solid materials'; 1990, Cambridge, Cambridge University Press.
27. A. POURSARTIP, M. F. ASHBY, and P. W. R. BEAUMONT: *Comput. Sci. Technol.*, 1986, 25, 193.
28. L. S. COSTIN: *Mech. Mater.*, 1985, 4, 149-160.
29. M. F. ASHBY and S. D. HALLAM: *Acta Metall.*, 1986, 34, 497-510.
30. G. C. SAMMIS and M. F. ASHBY: *Pageoph*, 1990, 133, 489-521.
31. V. M. SAMPLE and L. A. LALLI: in Proc. Conf. 'Aluminium technology '86', (ed. T. Sheppard), 175; 1986, London, The Institute of Metals.
32. J. H. BEYNON and C. M. SELLARS: *ISI J Int.*, April 1992.
33. H. R. SHERCLIFF and M. F. ASHBY: *Acta Metall. Mater.*, 1990, 38, 1782-1812.
34. R. DOHERTY: *Scr. Metall.*, 1985, 19, 927.
35. U. F. KOCKS, A. ARGON, and M. F. ASHBY: *Progr. Mater. Sci.*, 1975, 19, 1-288.
36. M. I. BASKES and R. Le SAR: personal communication at Los Alamos Workshop on 'Process modelling in materials', Los Alamos National Laboratory, NM, August 1991.
37. F. A. McCLINTOCK and G. IRWIN: STP 381, 1; 1965, Philadelphia, PA, ASTM.
38. P. BRIDGEMAN: 'Dimensional analysis', 2 edn; New Haven, CT, York University Press.
39. E. ISAACSON and M. ISAACSON: 'Dimensional models in engineering and physics'; 1975, New York, Wiley
40. L. KUBIN: personal communication, University of Cambridge, 1991.
41. R. KOBAYASHI: personal communication, Ryukoko University, Ohtzu, Japan, 1991.
42. A. D. ROLLETT, D. J. SROLOVITZ, and M. P. ANDERSON: *Acta Metall.*, 1988, 36, 2115.
43. M. F. ASHBY: in Proc. 1st Int. Conf. on 'Hot isostatic pressing', 1; 1987, Luleå, Sweden, Contek Publishing Co.
44. O. C. ZIENKIEWICZ: 'Finite element analysis in structural and continuum mechanics'; 1971, New York/London, McGraw Hill.
45. R. H. GALLAGHER: 'Finite element analysis: fundamentals', 1974, Englewood Cliffs, NJ, Prentice Hall.
46. F. A. LECKIE and D. R. HAYHURST: *Acta Metall.*, 1977, 25, 1059.
47. V. VITEK and D. J. SROLOVITZ (eds.): 'Atomistic simulation of materials'; 1989, New York, Plenum Press.
48. N. METROPOLIS, A. W. ROSENBLUTH, M. N. ROSENBLUTH, A. H. TELLER, and E. TELLER: *J. Chem. Phys.*, 1953, 21, 1087.
49. R. DOHERTY: in Proc 10th Risø Int. Conf. on 'Materials architecture', (ed. J. B. Bilde-Sorensen *et al.*), 31-50; 1989, Roskilde, Denmark, Risø National Laboratory.
50. M. S. DAW and M. I. BASKES: *Phys. Rev.*, 1984, B29, 6443.
51. M. S. DAW and M. A. SCHLITER (eds.): in MRS Symp. Proc. 'Atomic scale calculations of structure in materials', Vol. 193; 1990, Pittsburgh, PA, Materials Research Society.
52. A. E. CARLSON: 'Solid state physics', (ed. H. Ehrenreich and D. Turnbull), Vol. 43, 1; 1990, New York, Academic Press.
53. R. Le SAR, N. NAJAFABADI, and D. SROLOVITZ: *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 34, 1723.
54. V. HEINE: 'Solid state physics', (ed. H. Ehrenreich *et al.*), Vol. 24, 1; 1970, New York, Academic Press.
55. P. BALLONE, W. ANDREONI, R. CAR, and M. FARRINELLO: *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 60, 271.

100088北京有色金属研究总院赵福璋译自: *Materials Science and Technology*,
8 (Feb. 1992); 102-111 (褚幼义 程屏芬 董务民校)

《非线性动力学学报》创刊及征订

《非线性动力学学报》已于1993年10月创刊,主办单位中国振动工程学会,主编陈予恕。该学报为季刊,是以非线性动力系统、非线性振动、分叉和混沌理论以及它们在各类学科和工程中的应用为特点的全局综合性大型学术刊物,主要读者对象为从事非线性动力学方面研究及应用的科研人员、高等院校师生及工程技术人员。

该学报欢迎投稿,稿件寄:300072 天津大学力学系非线性动力学学报编辑分部;并欢迎订阅,订阅处为:410012 长沙市湖南大学力学系非线性动力学学报编辑部(每期定价3.50元,全年4期共14.00元)。

李家春 供稿