

元胞自动机方法模拟微观组织演变的建模框架

Model Framework for Microstructure Evolution

Modeling with Cellular Automata

郭洪民, 刘旭波, 杨湘杰

(南昌大学机电工程学院, 南昌 330029)

GUO Hong-min, LIU Xu-bo, YANG Xiang-jie

(School of Mechanical & Electrical Engineering,

Nanchang University, Nanchang 330029, China)

摘要: 基于元胞自动机模型的框架特性, 构建了基于扩展的元胞自动机的模型框架 MicrosCA。该模型不是针对某一具体应用的实际模型, 而是一个通用的模型框架, 阐述了构建微观组织模拟元胞自动机模型的主要思想、微观模型与其它模型间的集成。在此基础上, 可以针对不同应用问题, 对其进行适当细化和具体化, 以适合各种组织演变问题的分析研究。

关键词: 微观组织模拟; 元胞自动机; 模型框架

中图分类号: TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4381 (2003) 08-0023-05

Abstract: Based on the framework characteristic of cellular automaton model, a model framework named as MicrosCA was developed as a general framework model by extending the classical cellular automata. The present framework described brief ideas through which special cellular automaton model simulating and analyzing complicated microstructure evolution phenomena could be built up, and discussed coupling between micro-model and other analyzing models. MicrosCA was not a concretely practical model, but a scheme. Under the framework, it can be extended as practical instance to fulfill the analysis and investigation of various microstructure evolution problems.

Key words: microstructure modeling; cellular automata model; model framework

为了研究由大量个体相互作用所形成的复杂现象, 如自组织现象、耗散结构、合作效应, 计算机专家和物理学家从 20 世纪 80 年代开始对元胞自动机 (Cellular Automata, 简称 CA) 进行了深入研究。由于元胞自动机模型具有时间离散、空间离散、状态离散、元胞相互作用局部化和动力学演化同步性等特点, 因而与传统的数值计算和模拟方法比较, 元胞自动机模型能更好地模拟晶粒生长、分形晶体生长、化学过程、流体等难以解析表达的复杂现象, 甚至能够逼真地反映大量个体相互作用的细致结构模式^[1]。在金属学研究中, 依据不同的假设条件建立了许多解析模型, 进而模拟金属物理过程。最初研究者仍然采用解析流体力学方程的思想, 即根据解析公式进行数值离散, 再在离散的模拟空间上进行方程的模拟。尽管取得了许多成果, 但工作量非常巨大。元胞自动机模型是一个时空动态模型, 特别适合于复杂时空的动态模拟, 利用 CA 模型模拟材料微观结构演变日益受到国内外学者的重视^[2]。本文在元胞自动机模拟材料微观组织可行性和局限性基础上, 提出微观组织模拟建模框架 MicrosCA, 着重阐述建立专业性元胞自动机

模型的基本思想。

1 元胞自动机模拟材料微观组织的可行性和局限性

从 80 年代开始, Packard、Rappaz、Lee 和 Brown 等人相继用元胞自动机模型模拟研究金属凝固中结晶组织的形成, 随后涌现出更多的材料组织演变模型, 所涉及的过程包括凝固^[3, 4, 5]、晶粒长大和再结晶^[2, 6, 7]、共晶生长^[2, 8, 9]、相沉淀^[10]等。

1.1 元胞自动机模拟微观组织形成的可行性^[2, 4, 11, 12]

1.1.1 元胞自动机“自下而上”的构模方式, 符合复杂系统的形成规律及其研究方法

从方法论上看, 元胞自动机不是用繁杂的方程从整体上描述一个复杂系统, 而是系统构成单元的局部相互作用来模拟复杂系统的整体行为。元胞自动机采用典型的“自下而上”的构模方法, 这是大多数复杂系统研究方法所采用的思维方式, 是复杂科学所倡导的复杂性研究方法。

1.1.2 元胞自动机强大的计算能力适于模拟系统的

复杂行为

元胞自动机具有计算的完备性特征,可以模拟复杂系统的突现、混沌等特征,是模拟生态、环境、微观组织演变(金属凝固、再结晶、晶粒长大等)等高度复杂现象的有力工具。

(1) 计算完备性

元胞自动构造和计算上的简单性,丝毫没有限制其模拟复杂现象的能力。元胞自动机的构型是典型的组合爆炸性问题:构型取决于元胞自动机的数量、连接方式和每个元胞可取的状态。设元胞自动机中每个元胞存在 k 种状态,且与周围 n (包括中心元胞) 个邻居相联,则其邻域存在 k^n 种状态组合,映射函数将 k^n 种状态映射为 k 种状态中的一种,则共有 k^n 种状态函数。以一维元胞自动机为例,假设邻居类型为 Von-neumann 型,每个元胞有 10 种状态,则共有 $k^n = 10^{100000}$ 种映射方式。因此元胞自动机计算的完备性在理论上保证了元胞自动机模拟复杂现象的可行性。

(2) 突现计算能力

复杂现象最重要的特性是展示出“突现”的行为。“突现”一词用来指称在复杂的(非线性的)形态中许多相对简单单元彼此相互作用时产生出来的引人注目的整体特性。在微观组织形成和演变过程中,系统的表现型不能从它的基因型中推导出来。这里,基因型是指系统运作的简单规则,比如,康韦“生命”游戏中的两个规则;表现型是指系统的整体突现行为,比如“滑翔机”在生命格子中沿对角线方向往下扭动。用计算机的语言来说,正是自下而上的方法,允许在上层水平突现出新的不可预言的现象,这种现象对复杂系统来说是关键的。元胞自动机是一种非线性网络动力系统,其固有特性就是突现性计算能力,元胞自动机的映射函数是局部的、简单的,但在整体上却能表现出周期、混沌、自我复制等复杂行为和现象。

1.1.3 元胞自动机模型的时空离散特征易于计算机构建模型

计算机是建立在离散数学基础上的,连续的动力学模型在计算机上实现时,必须将时间和空间离散化,此过程会降低计算和模拟精度。元胞自动机在时间和空间上都是离散的,易于完成概念模型到计算机物理模型的转变。

1.1.4 灵活性和开放性

元胞自动机不是一种数理方程,而是一种方法框架。一方面,各领域的学者通过扩展元胞自动机的组成构件,提出和建立适合专题现象的扩展模型;另一方面,元胞自动机允许建模者在模型框架下,用各领域的专业规律构建转变规则,灵活地结合已有的相关专业模型。这些使得元胞自动机具有应用的广泛性、

灵活性和针对性。

1.1.5 非内禀标定性

微观组织模拟的元胞自动机模型是对连续体空间进行离散化和映射处理的派生方法,不存在物理特征线度或时间刻度的内禀标定问题,即,对连续体系统的元胞自动机模拟,需要定义相应的基本单元和对应的演变规则,以便恰当地展现系统在给定层次上的行为特性。所以元胞自动机方法可以模拟宏观-纳观整个微观组织空间的微观组织特性,即元胞自动机方法模拟材料微观组织时具有多面性^[2]。

1.2 元胞自动机模拟微观组织形成的局限性^[2, 4, 11, 12]

1.2.1 简单性与真实性之间的矛盾

CA 模型是客观问题的高度抽象和概化。在一定程度上,模型的概化程度(简单性)与真实性是矛盾的。元胞自动机确实能够简洁、直观而生动地再现空间复杂系统的动态演变,但真实性是元胞自动机模型面临的巨大挑战。在微观组织形成研究中,造成 CA 模型真实性受到质疑的主要原因有:

(1) 标准元胞自动机没有考虑宏观作用因素。系统的自组织等宏观突现来源于系统要素间的局部相互作用,但同时系统要素的行为并不仅仅取决于自身及其邻域的局部小环境,而且还受到系统大环境的影响。例如,在金属凝固模拟中,晶核的长大行为不仅取决于领域元胞的状态和液/固界面能等微观局部因素,而且还受到该区域的温度场、浓度场等宏观环境的限制。

(2) 标准元胞自动机的因素层过于单一。CA 模型中,元胞的状态变化仅取决于自身及其邻域的状态组合,此时的状态变量既是自变量又是因变量。而实际上,一个系统元素的行为并不仅仅取决于一个层面的变量,其受制因素是大量的。例如,在金属凝固过程中,一个液态元胞下一时间步是否凝固,不仅与其邻域已凝固单元有关,还取决于合金的物化性能,及该区域的温度、溶质浓度和界面取率等因素。

(3) 标准元胞自动机的状态转变规则往往是确定的。在实际复杂系统中,系统元素的行为是随机的,往往表现出某种倾向性和可能性。例如,在形核过程中的形核位置,晶粒长大时的生长方向都具有随机性。

因此,在实际应用中,需要在简单性和复杂性之间寻找一个平衡点,避免模型过于简单而造成模拟结果的不真实,同时又要防止模型过于复杂,而失去模型本身的意义和优势。

1.2.2 状态转变规则的定义

合理的转变规则是 CA 模型效果的关键。在模型中,规则是针对于抽象空间划分的单元,发生在单元间的局部相互作用。这个局部规则与宏观规律既有联系又有差别,其定义又是靠直觉和经验,而找到和实

际规律相符的映射函数难度相当大, 这是影响 CA 模型实际应用的重要因素。

2 MicrosCA 模型框架

由于元胞自动机本身就是一个模型框架, 扩展的实例元胞自动机模型在本质上有一定的相似性。MicrosCA 模型框架是元胞自动机在微观组织演变复杂现象研究应用的专题模型, 实质上是一个全方位扩展的元胞自动机模型, 旨在元胞自动机的框架下, 集成多种理论和方法, 构建模拟和分析微观组织演变的一个概念性和方法性的模型框架, 为元胞自动机在具体应用中提供理论和方法论意义上的支持, 主要包括扩展经典元胞自动机的组成元素、不同空间尺度模型间的耦合及 MicrosCA 模型的面向对象表述。

2.1 扩展经典元胞自动机

作为对连续体空间进行离散化和映射处理的派生方法, 元胞自动机模型模拟微观组织演变的实质是: 用金属学原理扩展元胞自动机的各组成要素, 将各要素进行相应的扩展并赋予相应的金属学含义, 使之恰当地展现系统在给定层次上的行为特征 (图 1)。

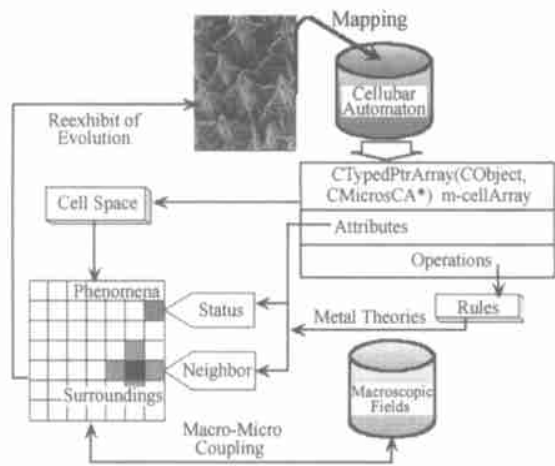


图 1 模型框架示意图

Fig. 1 Illustration of the present model framework

2.1.1 元胞及状态

在标准元胞自动机模型中, 元胞的状态集是一个有限、离散的集合, 每个元胞的状态取其中的一个值。而针对模拟和分析微观组织演变这一复杂过程, 元胞及其状态通常需要以下方面的扩展。

首先, 必须赋予元胞及其状态以相应的物理涵义, 这是任何专业化元胞自动机构模时的首要任务。在 MicrosCA 中, 元胞为被赋予了特定涵义的组织实体, 例如相沉淀模型中的各组份相。在元胞涵义定义基础上, 相应的元胞状态则有可能是温度、浓度、晶

体学取向、生长速度等组织实体的状态。

由于组织实体往往拥有多种状态, 且相互关联、相互影响, 联动变化。因而, 在模拟微观组织演变现象时, 元胞的状态通常是一个多元变量, 其中一个为主导变量。应针对不同的组织演变特性, 选择相应的变量个数和变量种类。其中, 主导变量的选取是建模关键部分之一。如在金属凝固组织演变模型中^[5], 元胞是一个抽象的组份相 (液相、固相), 它的状态包括熔体的温度、浓度、晶粒的生长速度等控制元胞状态的变量, 以及液相是尚未凝固、正在凝固或是已经凝固等反映凝固情况的变量, 这个变量是我们研究问题的主导变量。而模拟金属再结晶过程^[7], 主导变量为“已再结晶”、“未再结晶”两种, 控制变量主要有温度、局部晶体取向和存储的弹性能等。

2.1.2 元胞空间

元胞自动机模拟微观组织演变是将实际材料的组织结构映射到由微观元胞构成的模拟空间, 见图 1。从这个意义上讲, 元胞空间被赋予了空间尺度的概念, 元胞大小对应于空间分辨率。由于微观组织的多尺度特性, 不同空间尺度的微观组织具有不同的组织特性, 因此随着模拟空间尺度的变化, 元胞自动机的演变规则应做出相应的变化。

元胞空间由分布在模拟空间上的元胞构成, 元胞几何形状的选取应符合真实的物理规律, 二维元胞空间可按照三角形、四边形、六边形等几种网格排列。三角形网格的优点是拥有相对较少的邻居; 其缺点是在计算机显示与表达时困难, 须转变成四方网格。四方网格利于在现有计算机环境下进行表达; 其缺点是不能较好地模拟各向同性现象。六边形网格的优点是能较好地模拟各向同性现象, 模型更加自然而真实, 其缺点同三角形网格一样, 在表达和显示上较困难、复杂。元胞形状对微观组织有一定影响, 但可以通过相应算法进行调整, 减小元胞形状和大小对界面曲率、各项异性等影响。研究表明, 通过算法调整, 不同几何形状的元胞可以获得非常相近的模拟组织^[4, 6]。

目前, 模拟方法计算量较大是阻止三维微观组织模拟的主要因素之一。由于微观组织形成的复杂性及模拟对象空间尺度的限制, 模拟过程中所需的元胞数量非常庞大。例如, 模拟合金凝固过程中柱状晶生长的竞争机制, 所需元胞尺寸约为 $50\mu\text{m}$, 仅 1.25cm^3 模拟空间所需的立方型元胞就高达 1 千万, 占有内存量为 1Gbyte ^[13]。主要解决方法是在模型中引入自适应网格剖分^[13]和并行算法^[14]等先进计算技术, 减小计算量, 提高模型的计算能力。

2.1.3 邻居构型

元胞的邻居构型定义着元胞所处的局部环境, 进而影响着元胞的演变行为。在 MicrosCA 中, 邻居构

型的定义非常灵活和丰富,不同的邻居构型对应于不同微观组织演变现象。在材料微观组织演变中,形核过程与邻居构型无关,而生长速度和晶粒形貌与邻居构型关联紧密。一般的,大邻居构型(邻居数目多)获得的生长速度快于小邻居构型。金属再结晶过程^[7],邻居构型在相当程度上决定着未相互碰撞的晶粒形状,而对模拟最后获得的组织结构影响不大;研究表

明^[5],金属凝固组织形成模拟中Moor邻居可以获得比Von-numann邻居构型更为复杂的晶粒结构,但在较大尺度上两者获得的宏观组织没有明显差别。因此,在邻居构型的选择上主要靠经验和模拟对象表现的主要物理现象,图2是微观组织演变元胞自动机模拟中常用的几种邻居构型。

2.1.4 演变规则

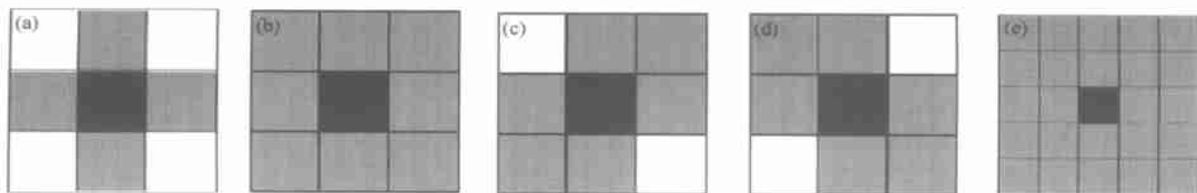


图2 微观组织模拟中常用的邻居构型

Fig. 2 General neighbor configuration used in microstructure simulation

(a) von numann neighbor; (b) moor neighbor; (c, d) 6 neighbor; (e) 24 neighbor

演变规则是元胞自动机模型的核心,它决定着元胞自动机的动态演化过程。框架模型中的规则集中体现了空间实体间的相互作用,这种相互作用根据不同应用而被赋予了不同的物理涵义。可以说,MicrosCA中的规则是微观组织演变特征和规律在局部和微观上的体现。在逻辑上,根据模型中的规则是不能够推理得到宏观规律的,这是复杂系统的研究原则。总之,MicrosCA中的规则虽然具有某种物理涵义,但是它与组织演变的宏观规律并不相同。例如,在模拟合金凝固微观组织演变时,根据模型中的形核与生长规则,在逻辑上我们无法确切地确定形核位置、晶粒形貌、枝晶间距、晶粒尺寸、晶粒度和组织的宏观形貌等宏观特征。这些宏观特征只有在模型运行时,才能动态地表现出来。元胞自动机的演变规则依赖于对系统宏观过程和真实物理机制的定性了解,有线性规则、非线性规则。如将规则模糊化,则可以有模糊规则;若将遗传算法和元胞自动机集成,则演变规则具有遗传性;另外,元胞的状态可以根据神经网络的阈值函数来更新。

模型中,根据金属学原理和不同的模拟对象定义其演变规则。鉴于微观组织演变过程的不确定性特征,MicrosCA常采用随机性规则,即在元胞状态和邻居构形确定的条件下,元胞的状态变化或动作并不是确定的,而是受到概率控制。另外,MicrosCA中的演变规则在整个演变过程不是恒定不变的,即将演变规则当作变量处理。一方面,不同的组织实体具有不同的状态和行为特性;一方面,随着模拟空间尺度的变化,演变规则亦应做出相应的改变;另一方面,由于材料不均匀性,材料不同部分的微观组织演变规则也

应做出相应的变化。

演变规则变化的控制有三种方法:一是人为地干预和调整,可以在模型运行若干循环后,暂停模型以重新调整规则,使得模型在下一时刻采用新规则运行。二是外来数据控制,将模拟空间根据材料属性之均匀性划分成不同区域,根据区域边界数据来调整不同区域内元胞的演变规则。三是模型控制、自发调整,即MicrosCA与宏观模型相结合,根据宏观模型的计算结果来自发自动地调整规则。这是最为复杂的一种方法,需要有机集成多种分析模型。值得关注的是,关于这方面报道的文献极少,仅文献[6]简略地讨论了方法二。

就所研究的对象而言,2.1.1中确定的元胞状态变量应包含在所使用的各种局部演变规则中。这一思想表明,根据局部的信息、数据及演变规则,可以对诸如复原、成核及其生长等现象的机理给出相应合理的惟象解释。

2.1.5 元胞自动机与面向对象

基于元胞自动机模型的框架性,在实际应用中,应该用研究对象的物理规律具体化标准元胞自动机,获得专业化元胞自动机模型。这非常类似于构建抽象的基类,通过添加新的数据成员和方法或改写虚拟函数,便可由基类构造生成符合实际应用的继承类。元胞自动机的主要构成元素为元胞的状态及决定元胞状态转变的演变规则,可以说,一个元胞本身就是状态和演变规则的集合体,即对象。因此,用类来表述元胞自动机模型非常自然、简单。

在元胞状态多元化扩展基础上,利用面向对象分析方法,可以将元胞及其状态进行封装,而进一步扩

展为具有某种“智能性”的组织实体。在这个组织实体中,元胞状态作为对象类的属性,元胞状态的演变则作为对象类的成员函数。成员函数具有感知环境、修正状态等行为。在许多情况下,元胞状态的变化通常还会进一步扩展为某种动作,如扩散、生长、溶解等。因此,在实际模型中,元胞状态是一个对象代码,这个代码对应一个组织实体。

按照元胞自动机的组成要素,其主要构成数据包括:(1)几何类型数据,如元胞形状、空间尺度、中心坐标、显示颜色等;(2)元胞状态数据,包括:①主导变量,表示元胞状态的改变;②控制变量,辅助元胞状态转变的变量;(3)元胞邻居。

基于MicrosCA的框架特性,由此扩展的专业模型本质上是相同的,依据面向对象的程序设计方法,可将其设计成一个纯基类(CMicrosCA)。按照(1-4)的扩展思想,可构建相应的继承类。

2.2 MicrosCA与其它模型间的集成

按照哈阿森(Haassen, 1984)的定义,所谓微观组织(Microstructure)是指所有热力学非平衡态的晶格缺陷在空间分布的集合;其空间尺寸可以从零点几纳米到数米量级。按照这样的线度体系的概念,可将材料微观组织的研究分成以下几个空间尺度^[2,15]:

(1)宏观工艺水平,典型数量级为0.01~1m,主要考虑力学、电磁场、流体动力学、温度场等现象;

(2)介观尺度,典型数量级为0.1~10mm,研究再结晶、晶粒形成(金属凝固)、相变等;

(3)微观尺度,典型数量级为1~100 μm ,研究扩散、界面运动、多晶、多晶粗化等;

(4)原子尺度,典型数量级为0.1~1nm,研究热力学、扩散及有序化系统、磁性系统、晶格缺陷与动力学特性等。

由于微观组织跨越的空间尺度范围很大,因此预测微观组织和微观结构性能之间的关系,越来越显示出同时采用多种不同空间尺度模型和模拟方法的必要性。到目前为止,发展的研究微观组织演变的模拟方法主要有:分子动力学方法、蒙特卡罗方法、元胞自动机、相场法、几何模型和拓扑学模型、有限元方法、有限差分方法和边界元法等。

上面提到的模拟方法,在创立之初就被限定在某一特定的空间尺度范围内,在其特定的应用场合都能比较精确地体现微观组织特性。目前尚未出现能够体现微观组织演变所有特性的模拟方法或模型。因此,针对所需要解决的具体问题,首要确定的是微观组织特性和采用的空间尺度层次。如果考虑的空间尺度范围较大,一般要引入模型化与集成化的概念,即通过计算机编码的耦合,把不同模拟层次的模型联系起来(集成),主要有同步集成和顺序集成两种方法。同步

集成指在一个计算机试验中同时考虑相应的不同模拟层次;顺序集成是一种较简单、常用的方法,它通过一个或一系列参数实现不同层次模型间的转换。关于不同尺度层次模拟间的耦合与集成的问题虽在一些文章中已有报道,但都集中体现在学术上^[2]。

MicrosCA模型主要用于解决介观-微观空间尺度范围内的微观组织特性,即晶粒的形成。此尺度层次的微观组织特性主要受到传热、传质、流动等宏观现象及微观的形核与生长动力学的影响。在微观层面可采用元胞自动机模型解决晶粒的形核与生长;宏观层面可以用有限元法或有限差分法解决宏观现象。这就涉及到MicrosCA模型与宏观温度场、浓度场、流场的耦合问题,目前常用的方法为顺序集成法。

3 结论

在对再结晶、晶粒生长及相变现象等形成的微观结构进行模拟时,元胞自动机方法体现出特有的多面性。这种多面性归因于其在考虑大量可能的元胞状态变量和演变规则时所展现的广泛适用性和灵活性。

微观组织演变模型框架MicrosCA的突出特点是框架性和开放性,一方面,该模型不是针对某一具体应用的实际模型,而是一个通用的模型框架,可为专业化模型的构建提供理论和方法论上的支持;另一方面,该模型框架需要不断的拓展和补充,希望广大读者将意见和感想反馈给作者。

参考文献

- [1] 赵松年. 元胞自动机和复杂性研究[J]. 物理, 1994, 23(9): 566-570.
- [2] D 罗伯. 计算材料学[M]. 北京: 化学工业出版社, 2002.
- [3] W J Boettinger, S R Coriell, A L Greer. Solidification Microstructures: Recent Developments, Future Directions[J]. Acta Mater, 2000(48): 43-70.
- [4] M Rappaz, J-L Desbiolles, G A Gandin. Modeling of Solidification microstructures[J]. Materials Science Forum, 2000(329-330): 389-396.
- [5] 郭洪民, 危仁杰, 杨湘杰. 一种改进的模拟凝固微观组织的宏观耦合模型[J]. 特种铸造及有色合金, 2003, (6).
- [6] Hesselharth H W, Gobel I P. Simulation of recrystallization by Cellular Automaton[J]. Acta Metall, 1991, 39(9): 2135-2143.
- [7] Marx V, Rehev F R, Gotlstein G. Simlation of primary recrystallization using a modified three dimensional cellular automaton[J]. Acta Mater, 1999, 47(4): 1212-1230.
- [8] Stephen Wolfram. Theory and Application of Cellular Automaton[C]. Singapore: World Scientific, 1986: 305.
- [9] Brown S G R. Simulation of Diffusional Composite Growth Using the Cellular Automaton Finite Difference[J]. J Mater Sci[J]. 1998, 33(19): 769-7773.

molecules, 1978, 11: 1126.

- [22] P J Flory, L L Chapoy. Recent Advances in Liquid Crystalline Polymers [M]. London: Elsevier, 1985. 99.
- [23] M. Ballauff. Phase equilibria in rodlike systems with flexible side chains [J]. Macromolecules, 1986, 19: 1366.
- [24] S Trohalaki, et al. Molecular dynamics simulation of a single-component molecular composite: poly (p-phenylene benzo-bisthiazole) / meta-poly (aryl ether ketone) block copolymer [J]. Polymer, 1996, 37: 1841.
- [25] P J Flory. Statistical thermodynamics of mixtures of rodlike particles: 6 rods connected by flexible joints [J]. Macromolecules, 1978, 11: 114.
- [26] M Ballauff. Soluble polyesters: an approach to molecular reinforcement [J]. Polym Adv Techn, 1990, 1: 109.
- [27] H.T. Land et al. Synthesis of arylsubstituted monomers for high-performance polymers [J]. Makromol Chem 1990, 191: 2005.
- [28] K Bhowmik, et al. Crystalline and liquid crystalline properties of polyesters of phenyl-substituted 4, 4'-biphenols and 1, 1'-binaphthyl-4, 4'-diol with either 2-bromoterephthalic acid or 2-phenyl-terephthalic acid [J]. Macromolecules, 1993, 26: 440.
- [29] S Claflen, et al. Integration of Fundamental Polymer Science and Technology IV [M]. P Lemstra ed, London: Elsevier Appl Publish, 1990.
- [30] W Huh, et al. Phase Behavior of Rod/Coil/Solvent Ternary Systems with Rod/Coil Interaction [J]. Polymer, 1992, 33: 789.
- [31] P C Painter, et al. Free volume in hydrogen bonding polymer blends [J]. Polym Prepr, 1990, 31 (1): 537-538.
- [32] M M Coleman, et al. Functional group accessibility in hydrogen bonded polymer blends [J]. Macromolecules, 1996; 29: 6820.
- [33] W Brostow, et al. Polydisperse polymer liquid crystals near the anisotropic-isotropic transition [J]. J Chem Phys, 1996, 105 (10): 4367.
- [34] H H Chuah, et al. Scaling analysis in the phase separation of poly (p-phenylene benzobisthiazole) / Nylon 66 rigid-rod molecular composites [J]. Polymer, 1989, 30: 1591.
- [35] W F Hwang, et al. Composites on a molecular level: phase relationships, processing, and properties [J]. J Macromol Sci Phys, 1988, B22 (2): 231.
- [36] J Clauss, et al. Determination of Domain Sizes in Heterogeneous Polymers by Solid-State NMR [J]. Acta Polym, 1993, 44: 1.
- [37] Y K Dai, et al. Molecular composites [J]. Pure Appl Chem, 1995, 67: 1991.
- [38] J W MacLachlan, et al. Characterization of rigid-rod molecular composites by photothermal and ultrasonic imaging [J]. Polymer Com, 1987, 28: 326.

(上接第 27 页)

- [10] 李才伟, 吴金平. 岩石中结晶颗粒竞争生长的随机元胞自动机模拟 [J]. 地球科学—中国地质大学学报, 1996, 21 (6): 593 - 595.
- [11] Stephen Wolfram. CA as models of complexity [J]. Nature, 1984, 311 (4): 419- 424.
- [12] Stephen Wolfram. Theory and application of Cellular Automaton [C]. Singapore: World Scientific, 1986: 126- 170.
- [13] Ch-A Gandin, J-L Desbriolles, M Rappaz. A Three-Dimensional Cellular Automaton-Finite Element Model for the Prediction of Solidification Grain Structure [J]. Metall Mater Trans A, 1999 (30A): 3153- 3165.
- [14] FENG Weiming, Xu Qingyan and LIU Baicheng. Microstructure simulation of aluminum alloy using parallel computing technique [J]. ISIJ International, 2002, 42 (7): 702- 707.
- [15] 柳白成, 荆涛. 铸造工程的模拟仿真与质量控制 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2001.

基金项目: 江西省自然科学基金项目 (0250006)

收稿日期: 2003-02-21; 修订日期: 2003-05-08

作者简介: 郭洪民 (1977-), 男, 博士, 联系地址: 南昌大学机电工程学院杨湘杰转 (330029)。

(上接第 39 页)

3 结论

(1) 在所研究的锻造温度范围内, 强度随加热温度的升高有提高的趋势, 且易满足技术条件要求。而塑性随加热温度的升高有下降的趋势, 且塑性值普遍偏低。锻后水冷下的塑性比空冷好。断裂韧性随加热温度的升高也有提高的趋势, 但 K_{IC} 值也普遍偏低。

(2) 拉伸强度和断裂韧性并不依赖于变形量, 而塑性随变形量的增大有提高的趋势, 因此, TB8 合金宜采用大变形程度。

(3) 宜采用相变点以上 20~40 的 β 锻造加常规锻造, 锻后采用水冷, 并选 800 /1h, WQ (固溶) + 560~580 /8h, WQ (时效) 的热处理制度, 可使强度-塑性-韧性得到较好的匹配。

参考文献

- [1] Ronald T M F. J Adv Mater Processess, 1993, 9: 24.
- [2] 周义刚, 张宝昌. 钛合金近 β 锻造研究 [J]. 航空学报, 1989, 10 (1): A60.
- [3] 俞汉清, 曾卫东, 等. Ti-17 合金 β 锻造研究 [J]. 西北工业大学学报, 1995, 13 (3): 341.
- [4] 朱知寿. Ti-15Mo-2.7Nb-3Al-0.2Si 钛合金强度与韧性匹配关系研究 [J]. 金属学报, 1999, 35 (Suppl 1): S159.

收稿日期: 2003-05-20

作者简介: 周晓虎 (1976-), 男, 助理工程师, 联系地址: 陕西三原红原航空锻铸工业公司技术中心 (713801)。

基金项目: 广东省自然科学基金团队项目 (20003038); 广东省教育万
优秀人才培养基金项目 (Q02014); 中山大学青年教师启动基金项目。

收稿日期: 2003-01-06; 修订日期: 2003-03-10

作者简介: 张艺 (1974-), 女, 讲师, 博士, 主要从事含芳香结构聚合物的合成及聚合物多相复合材料体系结构与性能的研究, 联系地址: 广东广州中山大学材料科学研究所 (510275)。