



教育部高等学校
材料科学与工程教学指导委员会规划教材

● 丛书主编 黄伯云

计算机在材料科学与工程中的应用

主 编 张朝晖
副主编 吴 波
主 审 叶卫平 王 鲁

Application of Computer
in Materials Science and
Engineering



中南大学出版社
www.csupress.com.cn



教育部高等学校
材料科学与工程教学指导委员会规划教材

● 丛书主编 黄伯云

计算机在材料科学与 工程中的应用



Application of Computer
in Materials Science and
Engineering



中南大学出版社

www.csupress.com.cn

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料科学与工程中的应用/张朝晖主编. —长沙:中南大学出版社,2008.9

ISBN 978-7-81105-699-0

I. 计... II. 张... III. 计算机应用-材料科学 IV. TB3-39

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第109747号

计算机在材料科学与工程中的应用

主编 张朝晖

责任编辑 周兴武

责任印制 汤庶平

出版发行 中南大学出版社

社址:长沙市麓山南路

邮编:410083

发行科电话:0731-8876770

传真:0731-8710482

印 装 湖南大学印刷厂

开 本 787×960 1/16 印张 19 字数 405千字

版 次 2008年9月第1版 2008年9月第1次印刷

书 号 ISBN 978-7-81105-699-0

定 价 39.00元

图书出现印装问题,请与经销商调换

内 容 简 介



本书为教育部高等学校材料科学与工程教学指导委员会规划教材,根据教育部高等学校材料科学与工程教学指导委员会本课程“教学基本要求”编写。

全书共分 10 章,其中第 1 章主要介绍计算机在材料科学与工程中的应用概况;第 2 章主要介绍材料科学研究中的数学模型及分析方法;第 3 章主要介绍材料科学研究中主要物理场的数值模拟;第 4 章主要介绍材料数据库与专家系统;第 5 章主要介绍计算机辅助材料设计与模拟;第 6 章主要介绍材料加工过程的计算机控制;第 7 章主要介绍材料检测中的计算机应用;第 8 章主要介绍数据与图形图像处理过程中的计算机应用;第 9 章主要介绍 Internet 与材料科学;第 10 章主要通过实验设计对所讲述的理论知识进行具体应用。

本书在理论描述与分析的基础上,主要侧重于计算机在材料科学领域的应用分析。相比同类教材,增加了实验设计与上机实践的内容,体现了新颖性的特点。本书可作为材料科学与工程专业本科生及研究生的专业基础课程教材,也可供从事材料科学与工程研究的工程技术人员参考。

教育部高等学校材料科学与工程教学指导委员会规划教材

编 审 委 员 会

主 任

黄伯云(教育部高等学校材料科学与工程教学指导委员会主任委员、中国工程院院士、中南大学教授、博士生导师)

副主任

姜茂发(分指委*主任委员、东北大学教授、博士生导师)

吕 庆(分指委副主任委员、河北理工大学教授、博士生导师)

张新明(分指委副主任委员、中南大学教授、博士生导师)

陈延峰(材物与材化分指委**副主任委员、南京大学教授、博士生导师)

李越生(材物与材化分指委副主任委员、复旦大学教授、博士生导师)

汪明朴(教育部高等学校材料科学与工程教学指导委员会秘书长、中南大学教授、博士生导师)

委 员

(以姓氏笔画为序)

于旭光(分指委委员、石家庄铁道学院教授)

韦 春(桂林工学院教授、博士生导师)

王 敏(分指委委员、上海交通大学教授、博士生导师)

介万奇(分指委委员、西北工业大学教授、博士生导师)

水中和(武汉理工大学教授、博士生导师)

孙 军(分指委委员、西安交通大学教授、博士生导师)

刘 庆(重庆大学教授、博士生导师)

刘心宇(分指委委员、桂林电子工业学院教授、博士生导师)

刘 颖(分指委委员、北京理工大学教授、博士生导师)

朱 敏(分指委委员、华南理工大学教授、博士生导师)

注：* 分指委：全称教育部高等学校金属材料工程与冶金工程专业教学指导分委员会；

** 材物与材化分指委：全称教育部高等学校材料物理与材料化学专业教学指导分委员会。

曲选辉(北京科技大学教授、博士生导师)
任慧平(教育部高职高专材料类教学指导委员会主任委员、内蒙古科技大学教授)
关绍康(分指委委员、郑州大学教授、博士生导师)
阮建明(中南大学教授、博士生导师)
吴玉程(分指委委员、合肥工业大学教授、博士生导师)
吴化(分指委委员、长春工业大学教授)
李强(福州大学教授、博士生导师)
李子全(分指委委员、南京航空航天大学教授、博士生导师)
李惠琪(分指委委员、山东科技大学教授、博士生导师)
余志明(中南大学教授、博士生导师)
余志伟(分指委委员、东华理工学院教授)
张平(分指委委员、装甲兵工程学院教授、博士生导师)
张涛(分指委委员、北京航空航天大学教授、博士生导师)
张文征(分指委委员、清华大学教授、博士生导师)
张建新(河北工业大学教授)
张建勋(西安交通大学教授、博士生导师)
沈峰满(分指委秘书长、东北大学教授、博士生导师)
杨贤金(分指委委员、天津大学教授、博士生导师)
陈文哲(分指委委员、福建工程学院教授、博士生导师)
陈翌庆(材物与材化分指委委员、合肥工业大学教授、博士生导师)
赵昆渝(昆明理工大学教授、博士生导师)
赵新兵(分指委委员、浙江大学教授、博士生导师)
周小平(湖北工业大学教授)
姜洪义(武汉理工大学教授、博士生导师)
柳瑞清(江西理工大学教授)
聂祚仁(北京工业大学教授、博士生导师)
郭兴蓬(材物与材化分指委委员、华中科技大学教授、博士生导师)
黄晋(分指委委员、湖北工业大学教授)
阎殿然(分指委委员、河北工业大学教授、博士生导师)
蒋青(分指委委员、吉林大学教授、博士生导师)
蒋建清(分指委委员、东南大学教授、博士生导师)
潘春旭(材物与材化分指委委员、武汉大学教授、博士生导师)
戴光泽(分指委委员、西南交通大学教授、博士生导师)

总 序



材料是国民经济、社会进步和国家安全的物质基础与先导，材料技术已成为现代工业、国防和高技术发展的共性基础技术，是当前最重要、发展最快的科学技术领域之一。发展材料技术将促进包括新材料产业在内的我国高新技术产业的形成和发展，同时又将带动传统产业和支柱产业的改造和产品的升级换代。“十五”期间，我国材料领域在光电子材料、特种功能材料和高性能结构材料等方面取得了较大的突破，在一些重点方向迈入了国际先进行列。依据国家“十一五”规划，材料领域将立足国家重大需求，自主创新、提高核心竞争力、增强材料领域持续创新能力将成为战略重心。纳米材料与器件、信息功能材料与器件、高新能源转换与储能材料、生物医用与仿生材料、环境友好材料、重大工程及装备用关键材料、基础材料高性能化与绿色制备技术、材料设计与先进制备技术将成为材料领域研究与发展的主导方向。不难看出，这些主导方向体现了材料学科一个重要发展趋势，即材料学科正在由单纯的材料科学与工程向与众多高新科学技术领域交叉融合的方向发展。材料领域科学技术的快速进步，对担负材料科学与工程高等教育和科学研究双重任务的高等学校提出了严峻的挑战，为迎接这一挑战，高等学校不但要担负起材料科学与工程前沿领域的科学研究、知识创新任务，而且要担负起培养能适应材料科学与工程领域高速发展需求的、具有新知识结构的创新型高素质人才的重任。

为适应材料领域高等教育的新形势，2006—2010年教育部高等学校材料科学与工程教学指导委员会积极组织材料类高等学校教材的建设规划工作，成立了规划教材编审委员会，编审委员会由相关学科的分教学指导委员会主任委员、委员以及全国30余所影响力和代表性的高校材料学院院长组成。编审委员会分别于2006年10月和2007年5月在湖南张家界和中南大学召开了教材建设研讨会和教材提纲审定会。经教学指导委员会和编审委员会推荐和遴选，逾百名来自全国几十所高校的具有丰富教学与科研经验的专家、学者参加了这套教材的编

写工作。历经几年的努力，这套教材终于与读者见面了，它凝结了全体编写者与组织者的心血，充分体现了广大编写者对教育部“质量工程”精神的深刻体会，对当代材料领域知识结构的牢固掌握和对高等教育规律的熟练掌握，是我国材料领域高等教育工作者集体智慧的结晶。

这套教材基本涵盖了金属材料工程专业的主要课程，同时还包含了材料物理专业和材料化学专业部分专业基础课程，以及金属、无机非金属和高分子三大类材料学科的实验课程。整体看来，这套教材具有如下特色：①根据教育部高等学校教学指导委员会相关课程的“教学大纲”及“基本要求”编写；②统一规划，结构严谨，整套教材具有完整性、系统性，基础课与专业课之间的内容有机衔接；③注重基础，强调实践，体现了科学性、实用性；④编委会及作者由材料领域的院士、知名教授及专家组成，确保了教材的高质量及权威性；⑤注重创新，反映了材料科学领域的新知识、新技术、新工艺、新方法；⑥深入浅出，说理透彻，便于老师教学及学生自学。

教材的生命力在于质量，而提高质量是永恒的主题。希望教材的编审委员会及出版社能做到与时俱进，根据高等教育改革和发展的形势及材料专业技术发展的趋势，不断对教材进行修订、改进、完善，精益求精，使之更好地适应高等教育人才培养的需要，也希望他们能够一如既往地依靠业内专家，与科研、教学、产业第一线人员紧密结合，加强合作，不断开拓，出版更多的精品教材，为高等教育提供优质的教学资源和服务。

衷心希望这套教材能在我国材料高等教育中充分发挥它的作用，也期待着在这套教材的哺育下，新一代材料学子能茁壮成长，脱颖而出。

董伯云

2008年9月

前 言



作为一种现代工具,计算机技术在材料科学与工程中的应用日益广泛,并在很大程度上促进了材料科学研究的深入发展。本书立足于材料科学与工程一级学科,对计算机在材料科学中广泛应用领域的知识点进行全面、系统的介绍,在必要的理论描述与分析的基础上,主要侧重于计算机在材料科学领域的应用分析,尤其突出国内外计算机在材料科学中的最新应用及其未来发展趋势。

本书主要特色:

1. 内容系统,重点突出。将计算机在材料科学领域的应用知识全面、系统地介绍给读者,同时对计算机在材料科学中的应用热点进行着重分析。

2. 结构严谨,知识新颖。内容需循序渐进,由浅入深,各章节之间相互独立又紧密联系;相关知识紧密结合国内外计算机在材料科学领域的最新应用技术,突出材料科学领域的新方法、新技术中计算机的应用。

3. 理论描述和实际应用相结合。理论知识介绍简明易懂,并在一定的理论描述基础上,介绍计算机在材料科学各领域的典型及特色应用实例,激发学生的学习兴趣。

4. 求同存异,适应面广。既考虑了材料专业各个研究方向的共性,又兼顾了材料科学研究领域的广泛性和各学科之间的相互渗透给计算机在材料科学中的应用所带来的复杂性和特殊性。

全书共分10章,分别介绍了材料科学进展与计算机应用技术;材料科学研究中的数学模型及分析方法;材料科学研究中主要物理场的数值模拟;材料数据库与专家系统;计算机辅助材料设计与模拟;材料加工过程的计算机控制;材料检测中的计算机应用;数据与图形图像处理过程中的计算机应用;Internet与材料科学;并通过实验设计对所讲述的理论知识进行具体应用。

本书由北京理工大学张朝晖主编,福州大学吴波副主编。其中第1章、第2章的第2、3、

6 节由北京理工大学张朝晖编写,第 2 章的第 1 节由天津大学黄远编写,第 2 章的第 4、5 节和第 9 章由北京理工大学范群波编写,第 3 章由东北大学秦皇岛分校王晓强编写,第 4、7 章由石家庄铁道学院张光磊编写,第 5 章由福州大学吴波编写,第 6 章由东北大学秦皇岛分校李明亚编写,第 8 章由河北理工大学蔡基伟编写,第 10 章由武汉理工大学叶卫平编写。全书由武汉理工大学叶卫平和北京理工大学王鲁主审。

由于计算机技术的发展非常迅速,计算机在材料科学研究领域中的应用又非常广泛,加之编者水平有限,疏漏和不妥之处在所难免,欢迎同行和读者指正。

编 者

2008 年 9 月

目 录

第1章 概 述	(1)
1.1 材料科学进展与计算机应用技术	(1)
1.2 计算机在材料科学中的应用	(2)
1.2.1 计算机模拟技术用于材料行为工艺研究	(2)
1.2.2 计算机技术用于材料数据库和知识库	(2)
1.2.3 计算机技术用于材料设计	(3)
1.2.4 计算机技术用于材料加工控制	(4)
1.2.5 计算机技术用于材料性能表征与检测	(5)
1.2.6 计算机技术用于材料数据和图像处理	(5)
1.2.7 计算机网络技术用于材料科学研究	(5)
参考文献	(6)
第2章 材料科学研究中的数学模型及分析方法	(7)
2.1 数学模型基础及建模方法	(7)
2.1.1 数学模型基础	(7)
2.1.2 建立数学模型的一般步骤和原则	(8)
2.1.3 常用的数学建模方法	(9)
2.2 有限差分法	(14)
2.2.1 有限差分法简介	(14)
2.2.2 有限差分法数学基础	(15)
2.2.3 有限差分法解题基本步骤	(17)
2.2.4 有限差分法解题示例	(18)
2.2.5 商用有限差分软件简介	(19)
2.3 有限元法	(20)
2.3.1 有限元法简介	(20)
2.3.2 有限元法常用术语	(21)
2.3.3 有限元法数学基础	(22)
2.3.4 有限元分析基本步骤	(23)

2.3.5	有限元法解题示例	(23)
2.3.6	有限元软件简介	(26)
2.3.7	ANSYS 有限元软件解题示例	(30)
2.4	蒙特卡洛方法	(64)
2.4.1	蒙特卡洛方法简介	(64)
2.4.2	蒙特卡洛模拟基本步骤	(64)
2.4.3	随机数的生成	(66)
2.4.4	蒙特卡洛法解题示例	(67)
2.5	分子动力学方法	(68)
2.5.1	分子动力学方法简介	(68)
2.5.2	分子动力学方法模拟基本步骤	(69)
2.5.3	势函数	(70)
2.5.4	边界条件	(71)
2.5.5	分子动力学积分算法	(72)
2.5.6	分子动力学中的系综	(73)
2.5.7	温度与压力的调节	(73)
2.5.8	宏观物理量的计算	(74)
2.5.9	分子动力学方法解题示例	(75)
2.5.10	分子动力学相关软件	(77)
2.6	人工神经网络方法	(78)
2.6.1	人工神经网络简介	(78)
2.6.2	人工神经网络基本结构	(79)
2.6.3	人工神经网络基本要素	(79)
2.6.4	误差反向传播神经网络(BP 网络)	(82)
2.6.5	人工神经网络方法解题基本步骤	(84)
2.6.6	人工神经网络方法解题示例	(86)
	习题及思考题	(88)
	参考文献	(91)
第3章	材料科学研究中主要物理场的数值模拟	(92)
3.1	温度场的计算	(92)
3.1.1	导热方程与边界条件	(92)
3.1.2	平面温度场的有限元求解	(94)
3.2	应力场计算	(95)

3.2.1	弹性力学基础	(95)
3.2.2	弹性问题分析	(98)
3.3	电磁场计算	(101)
3.3.1	电磁场计算方法概述	(101)
3.3.2	合金材料制备中的电磁场计算	(103)
3.4	浓度场计算	(106)
3.4.1	扩散控制方程	(106)
3.4.2	浓度场的数值解法	(107)
	习题及思考题	(109)
	参考文献	(110)
第4章	材料数据库与专家系统	(111)
4.1	数据库技术	(111)
4.1.1	数据库技术的产生和发展	(111)
4.1.2	数据库数据的主要特征	(112)
4.1.3	数据库系统	(112)
4.1.4	数据库管理系统	(113)
4.2	材料科学与工程数据库	(113)
4.2.1	材料数据库的发展	(113)
4.2.2	材料数据库的应用	(115)
4.3	专家系统	(116)
4.3.1	专家系统发展历史	(117)
4.3.2	专家系统的构成及工作原理	(117)
4.3.3	专家系统中的知识获取与推理	(118)
4.3.4	专家系统的特征和类型	(118)
4.3.5	专家系统在材料科学与工程中应用	(119)
	阅读资料	(125)
	习题及思考题	(126)
	参考文献	(126)
第5章	计算机辅助材料设计与模拟	(127)
5.1	材料设计概述	(127)
5.1.1	材料设计的定义、范围与层次	(127)
5.1.2	多尺度材料设计	(128)

5.2	材料设计基础	(130)
5.2.1	电子结构计算	(130)
5.2.2	材料热力学、动力学和相图计算	(135)
5.2.3	基于概率断裂力学的可靠性评价	(140)
5.3	材料设计软件及应用	(143)
5.3.1	量子化学第一性原理计算软件	(143)
5.3.2	材料热力学和相图计算软件	(154)
5.3.3	基于有限元分析和概率断裂力学的可靠性评价软件	(164)
5.4	计算机辅助材料设计与模拟举例	(165)
5.4.1	陶瓷材料的设计——掺杂 TiO_2 光催化剂的电子结构的第一性原理研究	(166)
5.4.2	金属材料的设计—— Ti_2AlNb 基合金的相结构设计	(169)
5.4.3	多场耦合应用实例——液态金属连续铸造工艺的多物理场模拟	(170)
	习题及思考题	(174)
	参考文献	(175)
第6章	材料加工过程的计算机控制	(176)
6.1	计算机控制概述	(176)
6.1.1	计算机控制的概念	(176)
6.1.2	计算机控制系统的结构和组成	(177)
6.1.3	计算机控制系统的分类	(180)
6.1.4	计算机控制系统的主要特点和基本要求	(183)
6.2	材料加工的计算机控制	(184)
6.2.1	加热炉温度控制	(184)
6.2.2	焊接过程的计算机控制	(186)
	习题及思考题	(190)
	参考文献	(191)
第7章	材料检测中的计算机应用	(192)
7.1	材料的物相及成分检测	(192)
7.1.1	X射线衍射分析	(192)
7.1.2	电子探针仪	(193)
7.1.3	光谱分析	(195)
7.2	材料的组织结构检测	(196)
7.2.1	定量金相分析	(196)

7.2.2 计算机仿真	(197)
7.3 材料的力学性能检测	(199)
7.3.1 万能材料试验机	(199)
7.3.2 冲击试验机	(201)
7.4 材料的物理性能测量	(203)
7.4.1 磁性测量中的计算机数据处理	(203)
7.4.2 超导材料特性曲线的计算机测量	(205)
7.4.3 金属熔点附近热物性参数的计算机测量	(207)
阅读资料	(209)
习题及思考题	(210)
参考文献	(210)
第8章 数据与图形图像处理过程中的计算机应用	(211)
8.1 数据与图像处理常用软件简介	(211)
8.1.1 Excel 软件简介	(211)
8.1.2 Origin 软件简介	(218)
8.1.3 Photoshop 软件简介	(224)
8.1.4 MatLab 图像处理工具箱简介	(227)
8.2 应用实例详解	(230)
8.2.1 数据处理实例	(230)
8.2.2 图形处理实例	(235)
8.2.3 图像处理实例	(240)
习题及思考题	(241)
参考文献	(242)
第9章 Internet 与材料科学	(243)
9.1 Internet 技术简介	(243)
9.2 Internet 在材料科学中的应用	(244)
9.2.1 强大的搜索引擎	(244)
9.2.2 与材料科学相关的专业网站	(245)
9.2.3 文献检索	(246)
习题及思考题	(252)

第 10 章 实验设计与上机实践	(253)
10.1 材料合成加工工艺单指标正交实验设计与实现	(253)
10.1.1 实验目的	(253)
10.1.2 问题描述与分析	(253)
10.1.3 求解步骤	(256)
10.1.4 习题及思考题	(258)
10.2 用曲线拟合实现材料科学研究中的数学建模	(262)
10.2.1 实验目的	(262)
10.2.2 问题描述与分析	(263)
10.2.3 求解步骤	(265)
10.2.4 习题及思考题	(267)
10.3 材料学科中物理场的数值模拟	(271)
10.3.1 实验目的	(271)
10.3.2 问题描述与分析	(271)
10.3.3 求解步骤	(272)
10.3.4 习题及思考题	(277)
10.4 理想溶液二元相图计算	(280)
10.4.1 实验目的	(280)
10.4.2 问题描述与分析	(280)
10.4.3 求解步骤	(281)
10.4.4 习题及思考题	(286)
参考文献	(287)

第1章 概述

1.1 材料科学进展与计算机应用技术

材料是人类社会发展的里程碑，是人类生产和生活水平提高的物质基础，同时也是现代文明进步的重要标志和发展高新技术的基础和先导。材料、能源和信息共同构成了人类社会赖以生存和发展的基本资源，是现代科学和现代文明的三大支柱。材料技术不仅是一个独立的技术领域，同时又是其他技术领域的基础，对其他技术领域起着引导、支撑的关键性作用。材料是人类社会进步和发展的标志，综观人类发现材料和利用材料的历史，每一种材料的广泛应用，都会把人类支配和改造自然的能力提高到一个新的水平，将人类社会的物质文明和精神文明向前推进一步。

材料具有普遍性和重要性，同时又具有多样性。工程上通常按照材料的物理化学属性将其划分为金属材料、高分子材料、陶瓷材料以及复合材料四大类。金属材料主要包括黑色金属材料和有色金属材料两类，是用量最大、用途最广的工程材料，向来占据材料消费的主导地位；高分子材料为有机材料，是由相对分子质量很大的分子组成，其主要原料是石油化工产品，主要包括塑料、橡胶、合成纤维、胶粘剂及涂料等；陶瓷材料为无机非金属材料，通常是指硅酸盐、金属与非金属元素的化合物；复合材料是由两种或两种以上的材料组合在一起而形成的一种多相固体材料，它兼具组成组分的优点并在一定程度上克服了各自的缺点，因此是一种优异的新型材料，复合材料按照其基体的不同可分为金属基复合材料、树脂基复合材料和陶瓷基复合材料三大类。

材料科学的概念源自于20世纪50年代，当时前苏联人造卫星先于美国上天，美国朝野上下大为震惊并迅速分析出自己落后的原因主要是先进材料研究与应用领域，于是美国的一些著名大学和研究机构相继成立了材料科学研究中心，旨在采用先进的科学理论与实验方法来研究并开发新材料。至此，便诞生了“材料科学”的新名词。

计算机是人类社会在不断探索 and 了解自然奥秘的发展过程中发明出来的计算工具，世界上首台计算机于1945年2月诞生于美国的宾夕法尼亚大学，虽然只有每秒5000次的运算速度、60 t的重量、150 kW的电力支持以及40万美元的造价，但它标志了一个新时代的到来，是人类社会发展过程中的一个里程碑。从第一台计算机的诞生到现在60余年的时间里，电子计算机的发展和普及可谓一日千里，并渗透到了社会生活的各个方面，成为人类社会不可或缺的组成部分，也已渗透到各个学科领域，成为人类社会现代化的标志，越来越显著地影