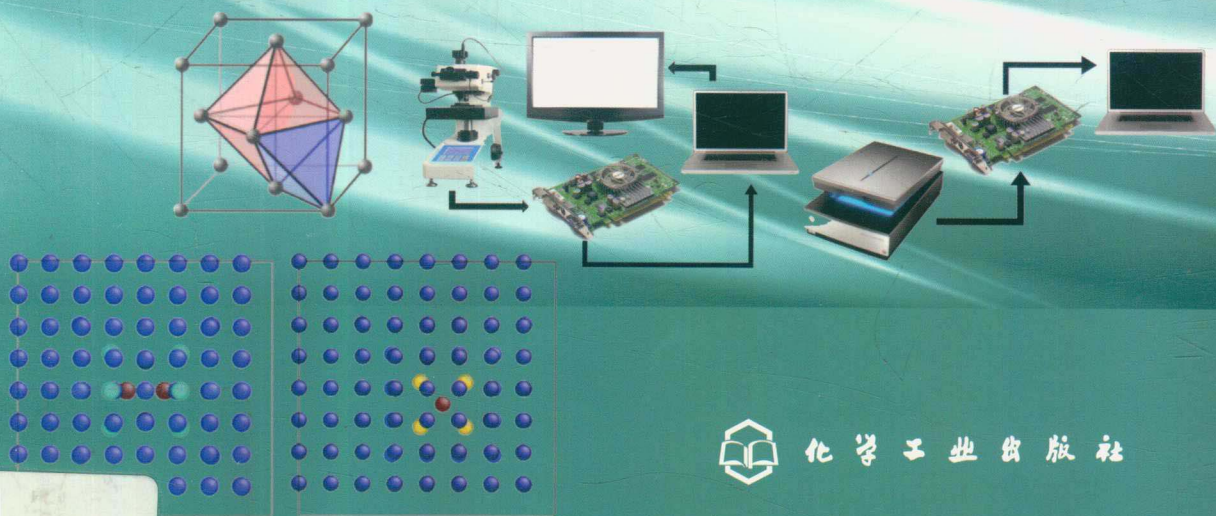


Application of Computer-based Technology in
Material Science and Engineering

计算机在材料科学 与工程中的应用

张鹏 赵丕琪 侯东帅 主编



化学工业出版社

Application of Computer-based Technology in
Material Science and Engineering

计算机在材料科学 与工程中的应用

张鹏 赵丕琪 侯东帅 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本书系统地介绍了计算机在材料科学中应用的基本理论、基本方法和相关应用。全书内容共分为9章,主要介绍了计算机在材料科学中的应用概况;数学模型及数值求解的方法;应力场、温度场与浓度场这几个典型物理场中的数值模拟方法;材料数据库、专家系统、神经网络的应用;材料科学中数据、图像的处理与分析方法;正交试验方法在材料科学中的应用;分子动力学在材料科学与工程中的应用;Rietveld/XRD精修在材料科学与工程中的应用等。本书在讲解理论的基础上,主要侧重于应用计算机的实际操作,翔实讲解了上机实验中所需的各种软件,使学生初步了解和掌握计算机知识在材料科学领域中的应用思路和方法,注重培养学生利用计算机解决实际问题的能力,培养和引导学生的创新意识。

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。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料科学与工程中的应用/张鹏,赵丕琪,
侯东帅主编. —北京:化学工业出版社,2018.5

ISBN 978-7-122-31757-5

I. ①计… II. ①张… ②赵… ③侯… III.

①计算机应用-材料科学-高等学校-教材 IV. ①TB3-39

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第051112号

责任编辑:彭明兰

装帧设计:韩飞

责任校对:宋夏

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印刷:北京市振南印刷有限责任公司

装订:北京国马印刷厂

787mm×1092mm 1/16 印张15 字数373千字 2018年7月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址:<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:49.00元

版权所有 违者必究

计算机技术的发展正改变着世界，对整个人类文明和社会进步产生了极其深远的影响。材料科学技术的发展也与计算机的发展分不开。计算机技术和网络技术等材料科学与工程中的传统产业的革新，已给材料产业带来了革命性的变化。而且，随着应用范围的扩大，所带来的经济效益和社会效益也日臻显著。为了进一步推动和促进计算机技术在材料科学领域中的应用和实践，使攻读材料专业的学生对计算机应用有更多的了解，作者结合多年来的教学和科研实践经验，编写了本书。本书的特色将体现在以下几方面。

(1) 结合材料科学领域中计算机应用的特点，做到专业与计算机应用之间的有效对接、融合，重在应用；既考虑了材料专业各个研究方向的共性，又兼顾材料科学研究领域的广泛性，以及各学科的相互渗透给计算机在材料科学与工程应用中带来的复杂性和特殊性。

(2) 充分考虑到材料科学与工程专业毕业设计时开展实验室试验的要求，不仅在计算机应用的理论上进行充分阐述，而且有针对性地讲述了材料科学与工程的试验设计。

(3) 本书内容较广泛，既要保证全书内容的完整性和系统性，又要避免与有关课程内容的重复。同时，涉及的计算机方面的理论知识或相关专业的专业理论，尽量做到适合材料科学与工程等相关专业学生使用。

(4) 在其他教材中较少涉及的分子动力学领域，本书将给予介绍，并阐述其在材料科学与工程中的特殊应用。

(5) 本书十分注重应用，在书中设置了大量的应用举例和涉及软件的上机实践，以达到在专业学习和研究过程中能够充分推广应用计算机的目的。

考虑到学生对于计算机使用的熟练程度和对于材料科学理论知识的理解程度参差不齐，本书在编写的过程中，坚持“教材的服务主体是学生，教材的生命力在实用”的原则，重视理论和实践的有机结合。本书在编写过程中既请教了有多年教学经验的资深教授，又将部分内容应用到在校学生的教学中，征求反馈意见，及时调整编写内容，不断修订完善，书中的内容都可在实际的教学过程中进行合理的增删，以便于学生的理解和掌握，同时又确保了编写内容的完整性和科学性。

本书由青岛理工大学张鹏、侯东帅和济南大学赵丕琪主编，其中，张鹏主要负责教材章节的设计、全书统稿，并编写第1章~第3章、第5章~第7章；赵丕琪负责编写第4章中的第1和第2节、第9章；侯东帅负责编写第4章中的第3节和第8章。刘兆麟承担了部分图片和公式的整理及编写工作。

本书在编写过程中参考了有关文献，由于条件所限，并未能将所有参考文献逐一列出，在此对相关文献的作者表示由衷的感谢。

随着计算机技术的日新月异，材料科学中各种各样的新思路、新方法、新工艺随着计算机运算能力的飞速提高而不断地涌现出来，加之编者理论水平和实践经验有限，书中难免有不足之处，敬请各位读者批评指正。

编者

2018年2月

第1章 绪论	001
1.1 计算机的发展和应用	001
1.1.1 计算机的发展历程	001
1.1.2 微型计算机的发展	004
1.2 材料科学与工程的概念和内容	005
1.2.1 涵盖的基本内容	005
1.2.2 材料的分类	005
1.2.3 材料的性能	005
1.2.4 基本要素	005
1.3 计算机在材料科学与工程中的应用简介	006
1.3.1 计算机技术用于数值计算与模拟	007
1.3.2 计算机技术用于材料数据和图像处理	007
1.3.3 计算机技术用于材料数据库和知识库	007
1.3.4 计算机技术用于材料设计	008
1.3.5 计算机技术用于材料性能表征与检测	008
1.3.6 计算机网络技术用于材料科学研究	009
第2章 数学模型及数值求解方法	010
2.1 数学模型的介绍	010
2.1.1 数学模型的含义	010
2.1.2 数学模型分类	011
2.1.3 建立数学模型的一般步骤和原则	012
2.2 常用的数学建模方法	013
2.2.1 机理分析法	013
2.2.2 模拟方法	014
2.2.3 类比分析法	016
2.2.4 数据分析法	017
2.3 数学模型的求解方法	019
2.3.1 有限差分法	019
2.3.2 有限元法	025

第3章 材料科学研究中主要物理场的数值分析的模拟 038

3.1 应力场模型与计算	038
3.1.1 弹性力学基础	038
3.1.2 应力场的有限元计算	041
3.1.3 工字悬臂梁挠曲变形的模型建立与计算	046
3.1.4 开孔矩形板受荷载作用变形的模型建立与计算	050
3.2 温度场模型与计算	055
3.2.1 热传递的基本方式与导热微分方程	055
3.2.2 初始条件与边界条件	058
3.2.3 二维稳态导热问题的有限差分求解	059
3.2.4 非稳态导热问题的有限差分求解	061
3.2.5 有限元法求解	064
3.2.6 发电厂烟囱温度分布模型的建立与计算	069
3.2.7 短圆柱体热传导过程的模型建立与计算	073
3.3 浓度场模型与计算	080
3.3.1 扩散控制模型	081
3.3.2 有限元求解	082
3.3.3 半无限长钢板碳扩散情况的模型建立与计算	085
3.3.4 Hydrus 介绍与实例	091
思考题与上机操作题	096

第4章 材料数据库和人工神经网络 099

4.1 材料数据库	099
4.1.1 数据库的组成与结构	099
4.1.2 材料科学与工程数据库	100
4.2 专家系统	101
4.2.1 专家系统基本知识	101
4.2.2 材料科学与工程中专家系统举例	103
4.3 人工神经网络技术及其应用	108
4.3.1 人工神经网络	108
4.3.2 神经网络的学习方法与规则	110
4.3.3 神经网络在材料科学与工程中的应用	111
思考题与上机操作题	114

第5章 材料科学与工程中的数据处理与分析 115

5.1 数据处理的基本理论	115
---------------	-----

5.1.1	曲线拟合和最小二乘法	115
5.1.2	线性插值法	120
5.2	Origin 软件在数据处理中的应用	123
5.2.1	Origin 软件介绍	123
5.2.2	Origin 软件的基本功能和使用方法	124
5.2.3	Origin 在数据处理中的应用实例	129
	思考题与上机操作题	140

第6章 材料科学与工程中的图像处理 142

6.1	图像与图像处理	142
6.2	数字图像的获得途径	143
6.3	Photoshop 软件进行图像处理与分析举例	143
6.3.1	Photoshop 六大基本功能	144
6.3.2	Photoshop 图例	144
6.4	MatLab 软件进行图像处理与分析举例	151
6.4.1	MatLab 的主要功能	151
6.4.2	基本操作	151
6.4.3	MatLab 语言基础	153
6.4.4	MatLab 程序设计初步	154
6.5	Image J 软件进行图像处理与分析举例	156
6.5.1	Image J 的界面	156
6.5.2	图片编辑与分析	159
6.5.3	测量和计数	160
	思考题与上机操作题	163

第7章 正交试验方法在材料科学与工程中的应用 165

7.1	正交试验设计的基本原理	165
7.1.1	正交表介绍	166
7.1.2	正交性原理	167
7.2	正交试验设计的基本方法	168
7.3	正交试验设计在材料科学与工程中的应用	172
7.4	正交试验的方差分析方法	174
	思考题与上机操作题	178

第8章 分子动力学在材料科学与工程中的应用 179

8.1	分子动力学介绍	179
8.1.1	力场	180
8.1.2	分子动力学基本原理	183

8.1.3	分子动力学计算流程	185
8.1.4	分子动力学的一些基本算法	186
8.1.5	系综的分类	187
8.1.6	周期性边界条件	188
8.1.7	输出轨迹分析	188
8.2	常用的分子动力学软件	191
8.2.1	Lammps	191
8.2.2	Materials Studio	192
8.2.3	Materials Studio 在材料科学中常用的模块介绍	192
8.3	分子动力学在材料科学与工程中的应用举例	193
8.3.1	Materials Studio 算例	193
8.3.2	Lammps 算例	197
	思考题与上机操作题	203

⇒ 第9章 Rietveld/XRD精修在材料科学与工程中的应用 --- 206

9.1	Rietveld/XRD 方法介绍与基本理论	206
9.1.1	XRD 衍射峰的理论计算	206
9.1.2	Rietveld 定量精修	210
9.1.3	Rietveld 结构精修	213
9.1.4	Rietveld 全谱拟合正确性数值判断	214
9.2	Rietveld 精修软件——GSAS-EXPGUI 介绍	215
9.2.1	软件菜单栏界面介绍	215
9.2.2	软件选项栏界面介绍	219
9.3	Rietveld 定量精修在材料科学与工程中的应用	223
9.3.1	基于标样 $\text{SiO}_2\text{-ZnO}$ 二元体系的精修策略和准确性验证	223
9.3.2	水泥基材料的 Rietveld 精修定量策略	226

⇒ 参考文献 ----- 232

· 第 1 章 ·

绪 论

1.1 计算机的发展和应用

1.1.1 计算机的发展历程

世界上第一台电子计算机 ENIAC (electronic numerical integrator and calculator, 电子数字积分计算机) 于 1946 年诞生在美国宾夕法尼亚大学。虽然从外观上看它是个庞然大物, 就其性能上看却远逊于现在的微型计算机, 即 PC 机, 但这并不影响它成为 20 世纪科学技术发展进程中最卓越的成就之一。它的出现为人类社会进入信息时代奠定了坚实的基础, 有力地推动了其他科学技术的发展, 对人类社会的进步产生了极其深远的影响。

20 世纪 40 年代中期, 冯·诺依曼 (John von Neumann) 参加了宾夕法尼亚大学的莫尔小组, 1945 年设计电子离散可变自动计算机 EDVAC (electronic discrete variable automatic computer), 将程序和数据以相同的格式共同储存于存储器。这使得计算机可以在任意点暂停或继续工作, 机器结构的关键部分是中央处理器 (central processing unit, CPU), 它使计算机所有功能通过单一的资源统一起来。

1946 年, 美国物理学家约翰·莫奇利 (John Mauchly) 和他的学生爱克特 (Eckert) (图 1-1) 研制成功世界上第一台电子计算机 ENIAC (图 1-2)。

今天, 计算机的应用已经渗入社会的各行各业和人们生活的方方面面, 在人类社会变革中起到了无可替代的作用。从农业社会末期到工业社会的过渡, 以及当今的信息化社会, 计算机技术的应用正在逐渐改变人们传统的学习、工作和生活方式, 推动社会的飞速发展和文明程度快速提高。

从计算机硬件构造上看, 计算机的发展历史一般分成四个时代。

(1) 第一代计算机——电子管时代 (1946~1957 年) 这一时期的计算机如图 1-3 所示, 主要采用电子管作为其逻辑元件, 它装有 18000 多只电子管和大量的电阻、电容, 内存仅几千字节。数据表示多为定点数, 采用机器语言和汇编语言编写程序, 运算速度大约每秒 5000 次加法或者 400 次乘法, 首次用电子线路实现运算。



图 1-1 计算机的创始人莫奇利和爱克特

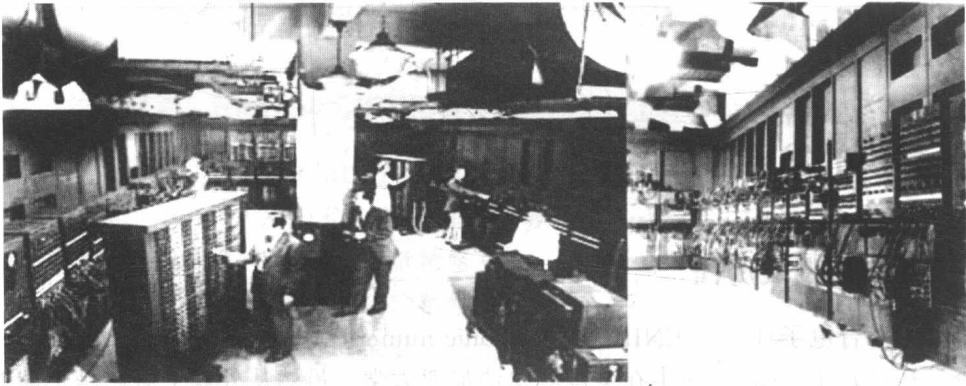


图 1-2 世界上第一台电子计算机 ENIAC

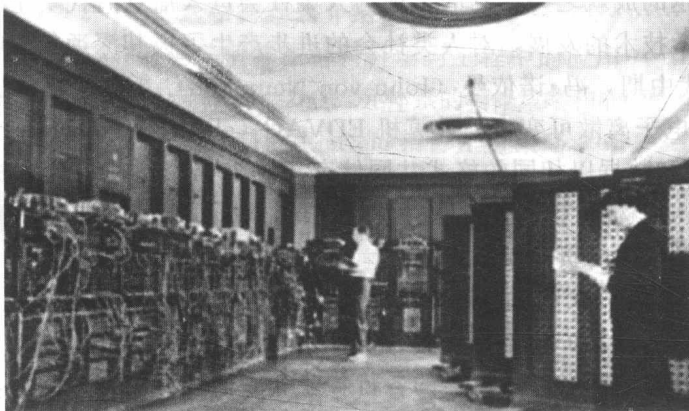


图 1-3 电子管计算机

(2) 第二代计算机——晶体管时代 (1958~1964 年) 其基本特征是采用晶体管作为主要元器件, 进而取代了电子管。内存采用了磁芯存储器, 外部存储器采用了多种规格型号的磁盘和磁带, 外设也有了很大的发展。此间计算机的运算速度提高了 10 倍, 体积缩小为原来的 1/10, 成本降低至原来的 1/10。更可喜的是, 此间计算机软件有了重大发展, 出现了 FORTRAN、COBOL、ALGOL 等多种高级计算机编程语言。第一台晶体管计算机如图 1-4 所示。

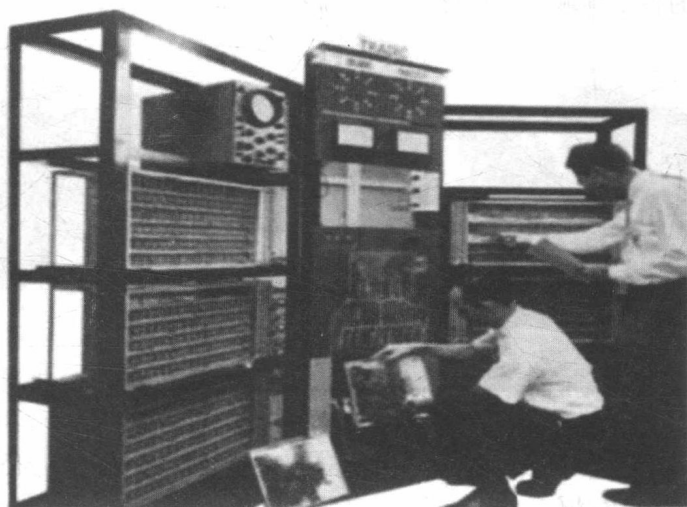


图 1-4 第一台晶体管计算机

(3) 第三代计算机——集成电路时代 (1965~1970 年) 随着半导体物理技术的发展, 出现了集成电路芯片技术, 在几平方毫米的半导体芯片上可以集成数百只电子元器件, 小规模集成电路作为第三代电子计算机的重要特征, 同时也催生了电子工业的飞速发展。第三代电子计算机的杰出代表有美国 IBM 公司 (国际商业机器公司) 1964 年推出的 IBM S/360 计算机, 如图 1-5 所示。

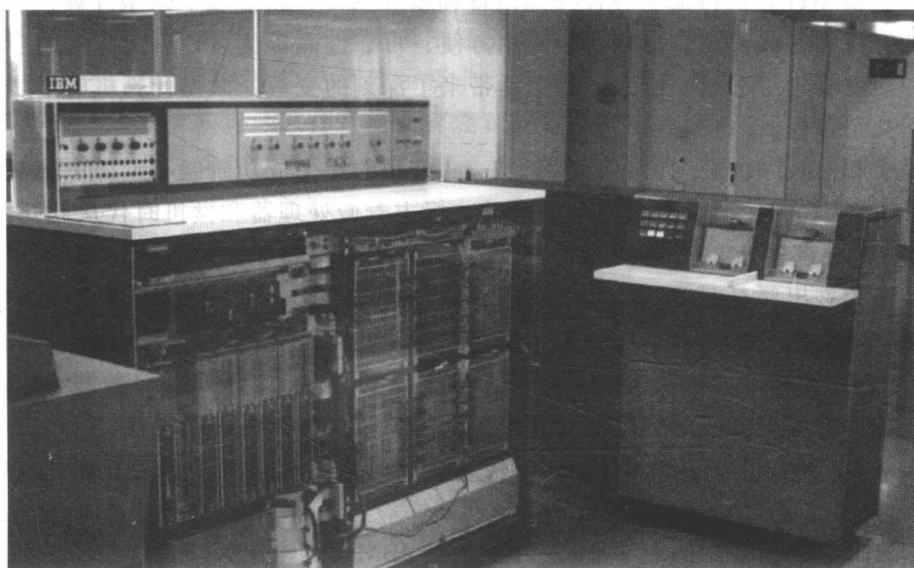


图 1-5 IBM S/360 计算机

(4) 第四代计算机——超大规模集成电路时代 (1971 年至今) 进入 20 世纪 70 年代, 计算机的逻辑元器件采用超大规模集成电路技术, 器件集成度得到大幅提升, 运算速度达到每秒上百亿次浮点运算。集成度很高的半导体存储器取代了以往的磁芯存储器。此间, 操作系统不断完善, 应用软件的开发成为现代工业的一部分; 计算机应用和更新的速度更加迅猛, 产品覆盖各类机型; 计算机的发展进入了以计算机网络为特征的时代, 计算机真正开始

快速进入社会生活的各个领域。大型计算机如图 1-6 所示。

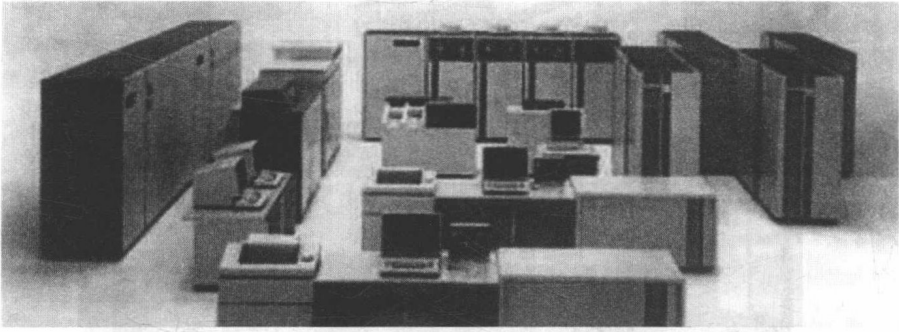


图 1-6 大型计算机

1.1.2 微型计算机的发展

微型计算机是第四代计算机的典型代表。电子计算机按体积大小可以分为巨型机、大型机、中型机、小型机和微型机，这不仅是体积上的简单划分，更重要的是其组成结构、运算速度和存储容量上的划分。

随着半导体集成技术的迅速发展，大规模和超大规模集成电路的应用，出现了微处理器（microprocessor unit, MPU）、大容量半导体存储器芯片和各种通用的或可专用的可编程接口电路，诞生了新一代的电子计算机——微型计算机，也称为个人计算机（personal computer, PC）。微型计算机再加上各种外部设备和系统软件，就形成了微型计算机系统。

微型计算机具有体积小、价格低、使用方便、可靠性高等优点，因此广泛用于国防、工农业生产和商业管理等领域，给人们的生活带来了深刻的变革。微型计算机的发展，大体上经历了以下几个过程。

(1) 霍夫和 Intel 4004 1971 年 1 月，Intel 公司的霍夫成功研制了世界上第一块 4 位微处理器芯片 Intel 4004，第一代微处理器问世，标志着微处理器和微机时代从此开始。

(2) 8 位微处理器 8080 1973 年，Intel 公司又成功研制了 8 位微处理器 8080，随后其他许多公司竞相推出微处理器、微型计算机产品。1975 年 4 月，MITS 发布第一个通用型 Altair8800，售价 375 美元，带有 1KB 存储器，这是世界上第一台微型计算机。

(3) Apple II 计算机 1977 年美国苹果公司推出了著名的 Apple II 计算机，它采用 8 位微处理器，是一种被广泛应用的微型计算机，开创了微型计算机的新时代。

(4) IBM 与“PC 机” 20 世纪 80 年代初，当时世界上最大的计算机制造公司——美国 IBM 公司推出了名为 IBM PC 的微型计算机。

1981 年 IBM 公司基于 Intel 8088 芯片推出的 IBM-PC 计算机以其优良的性能、低廉的价格以及技术上的优势迅速占领市场，使微型计算机进入一个迅速发展的实用时期。

世界上生产微处理器的公司主要有 Intel（英特尔）、AMD（超微）、Cyrix（赛瑞克斯）、IBM 等，美国的 Intel 公司是推动微型计算机发展最为著名的微处理器公司。在短短十几年内，微型计算机经历了从 8 位到 16 位、32 位再到 64 位的发展过程。

当前计算机技术正朝着巨型化、微型化、网络化、智能化、多功能化和多媒体化的方向发展。而其日益增长的运算能力和各大软件的逐渐完善，也使得计算机在材料科学与工程领域的应用越来越广泛，地位也越来越重要。

1.2 材料科学与工程的概念和内容

材料是人类生产和生活水平提高的物质基础,其发展和应用是人类文明和进步的重要支柱。自19世纪以来由于科学技术的进步、生产的发展,人们对材料不断提出新的要求,有些要求完全超出了天然材料所能提供的性能,从而促进了人类开始对材料从依靠天然到主动创造的转变,对材料的认识也逐渐由经验形成一门学科。到了20世纪60年代,人们把材料、能源与信息称为当代文明的三大支柱,70年代又把新材料、信息技术和生物技术看成是新技术革命的主要标志,这表明材料的发展与社会文明的进步有着十分密切的关系,现代科学技术的发展历程也充分证明了这一点。时至今日,人们已经掌握了材料的组成、结构和性能之间的内在关系,能够按照使用要求对材料进行设计创造。

材料科学与工程是研究有关材料的成分、结构和制造工艺与其性能和使用性能间相互关系的知识及这些知识的应用的一门应用型基础科学,发展至今已形成了自己的知识体系,涉及许多概念。在进入20世纪以后,由于各学科的交叉,尤其是计算机技术的应用使这门学科发展迅速。

1.2.1 涵盖的基本内容

材料科学是一门科学,它着重于材料本质的发现、分析方面的研究,它的目的在于提供材料结构的统一描绘,或给出模型,并解释这种结构与材料性能之间的关系。材料科学为发展新型材料,充分发挥材料的作用奠定了理论基础。

材料工程属于技术的范畴,目的在于采用经济而又能为社会所接受的生产工艺、加工工艺控制材料的结构、性能和形状以达到使用要求。所谓“为社会所接受”指的是材料制备过程中要考虑到与生态环境的协调共存,简而言之,就是要控制环境污染。材料工程水平的提高可以大大促进材料的发展。

1.2.2 材料的分类

材料的分类方法很多。根据其组成与结构可以分为金属材料、无机非金属材料、有机高分子材料和复合材料等;根据其性能特征和作用分为结构材料和功能材料;根据用途还可以分为建筑材料和能源材料、电子材料、耐火材料、医用材料和耐腐蚀材料等。

1.2.3 材料的性能

材料的性能是材料对电、磁、光、热、机械载荷的反应,而这些性能主要取决于材料的组成与结构。

材料使用性能是材料在使用状态下表现出来的行为,它与设计和工程环境密切相关,还包括可靠性、耐用性、寿命预测和延寿措施。

1.2.4 基本要素

材料的成分和结构、制造工艺、性能以及使用性能被认为是材料科学与工程的基本要素。其相互关系如图1-7所示。

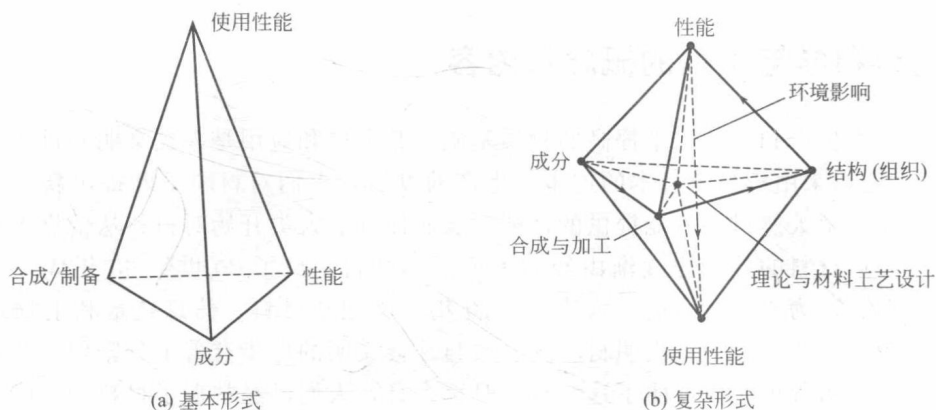


图 1-7 材料科学基本要素之间的关系

1.3 计算机在材料科学与工程中的应用简介

计算机在材料科学与工程中的应用是以计算机为手段，通过理论和计算对材料的固有性质、结构与组分、使用性能及合成与加工进行综合研究的一门新学科方向，其目的在于使人们能主动地对材料进行结构、功能与工艺的优化与控制，以便按需要开发及制备新材料。

把计算机应用于材料科学的思想产生于 20 世纪 50 年代，其形成为一门独立的新兴学科则是 80 年代以后的事，在我国 90 年代逐步有学者进行这方面的研究尝试工作。近年来，现代科学（信息技术、量子力学、统计物理、固体物理、量子化学、计算科学、计算机图形学等）理论和方法技术的飞速发展，以及计算机能力的空前提高为材料计算机模拟提供了理论基础和有力手段。

高技术新材料是现代知识经济的重要组成部分，其发展日新月异，这为材料的计算与设计提供了发展机遇和广阔空间。计算机在材料领域中的应用具有以下特点：①具有前瞻性；②具有创新性；③可减少或替代实验室工作；④降低研究及生产成本。

目前，随着材料科学研究工作的广泛开展和不断深入，有关“计算机在材料科学与工程中的应用”的科技文献资料迅速增多。但这些文献大都出现在学术期刊或会议文集之中，还缺少既包括基本原理又包括最新研究成果的系统性、综合性书籍，相关面向本科生、研究生的教材就更少。但 21 世纪新材料在国民经济建设中的地位越来越重要，越来越多的人也想了解材料科学的新进展，想利用计算机技术接触这一新的发展方向，缩小与国外的差距。通过本书的学习，应该能掌握以下知识与技能。

(1) 使材料科学与工程专业的学生了解计算机在材料科学中应用的现状和发展趋势，知道所要从事的材料科学研究领域中应当掌握哪些计算机技术和知识。

(2) 通过本门课程的学习引导，使他们初步掌握一些计算机在材料科学中应用的入门知识和技能，在面对这个新领域时能比较轻松。

(3) 通过学习本书所介绍的计算机应用技术和软件在材料科学中的应用，提高材料科学工作者从事材料研究工作时的效率和水平。

1.3.1 计算机技术用于数值计算与模拟

(1) 数值计算 材料科学研究在试验中可获得大量的试验数据,这是材料科学研究中获得的第一手资料,也是非常重要的原始数据。往往这些需要处理的数据比较复杂,数据的精度要求较高,仅凭人工计算处理难以达到精度要求,即使能达到,也要花相当多的时间和精力,且出错的概率很大。随着计算机软、硬件技术的发展,利用计算机程序处理数据可以节约大量人力和物力,同时还可以保证数据的精度。

目前常用的数据计算方法有 Gauss 消元法、最小二乘法、数据拟合和回归分析等,常用的计算机程序语言有 Fortran 语言、C 语言、Basic 语言等。

(2) 数值模拟 当前,在材料科学领域,计算机模拟技术主要应用为数值模拟技术。数值模拟是指用一组控制方程来描述一个过程的基本参数变化关系,采用数值方法求解,以获得该过程,即对过程进行动态模拟分析,在此基础上判断工艺或方案的优劣、预测缺陷、优化工艺等。数值模拟是材料科学研究从“经验”走向“科学”,从“定性分析”走向“定量分析”的桥梁。

1.3.2 计算机技术用于材料数据和图像处理

材料科学中的试验为材料科学研究提供了大量含有材料基本行为特征信息的试验数据,如何快速精确地处理这些复杂的数据,发现其中的规律,从而得到真实客观的材料行为信息,对材料科学研究而言非常重要。现代计算机的大容量存储特征和快速运算功能为存储和处理大量的材料试验数据提供了很好的平台。计算机对材料数据的处理工作主要包括存储、计算、绘图、拟合分析及快速查询等。目前,可用于材料数据处理的软件很多,如最小二乘法数据处理软件、X 衍射数据处理软件、DPS 数据处理软件、Excel 软件、Origin 软件、Image J 软件等,其中的典型代表是 Origin 软件,可以对材料科学数据进行一般的处理,并能实现数据绘图、曲线拟合等功能。

计算机图像分析已成为辅助研究材料结构和性能之间定量关系的一种重要方法。其应用涉及材料科学研究的各个方面,主要包括晶粒度的测量,夹杂物的评级,相分析,以及显微硬度、孔洞率、球化率、圆度、涂层厚度的测量等。

1.3.3 计算机技术用于材料数据库和知识库

由于工程材料的种类繁多,而每一种材料都有其特定的成分、结构及性能,因此所有工程材料的成分、结构及性能就构成了一个庞大的信息系统,为了便于材料工作者查询和研究,有必要建立各种类型的材料数据库。材料数据库一般应包括材料的性能及一些重要参量的数据,如材料成分、处理、试验条件以及材料的应用与评价等。目前已建立了许多不同类型的材料数据库,如中国科学院金属研究所的材料数据库,该数据库提供了纳米材料数据、高温合金数据、钛合金数据、精密管材数据、材料连接数据、材料腐蚀数据和失效分析等方面的数据;美国材料性能数据库,该数据库提供了铝合金、铜合金、镁合金、钛合金、镍基合金、铸铁、金属间化合物、碳化物、金属基复合材料、陶瓷基复合材料、高分子材料、透明材料等约 2000 个牌号的相关性能数据;美国国家标准研究所(NIST)材料数据库,包括陶瓷数据库、复合材料数据库;日本国立材料科学研究所材料数据库,包括晶体结构基本数

数据库、材料结构数据库、压力容器材料数据库和扩散数据库等；Matweb 材料性能数据库，该数据库提供了铝合金、钴、铜、铅、镁、高温合金、钛和锌合金、陶瓷材料、热塑性和热固性高聚物等材料的性能数据。这些数据库在材料设计与研究方面发挥了巨大作用。

知识库中的内容主要是材料成分、组织、工艺和性能间的关系以及材料科学与工程的有关理论成果，它是实现人工智能的基本条件。实际上知识库就是材料计算设计中的一系列数理模型、用于定量计算或半定量描述的关系式的总和。近年来国际上兴起了数据库知识技术 KDD（知识发现），它是一种以强调归纳逻辑推理为特色和自适应寻找规律为目标的知识库系统构造方法。数据库中存储的是具体的数据值，它只能进行查询，不能推理，就像仓库一样。而知识库中存储的是规则、规律，通过数理模型的推理、运算，以一定的可信度给出所需的性能等数据；也可利用知识库进行成分和工艺控制参量的计算设计。利用数据库和知识库可以实现材料性能的预测功能和设计功能，达到设计的双向性。

材料设计专家系统是指具有相当数量的与材料有关的各种背景知识，并能运用这些知识解决材料设计中有关问题的计算机程序系统。自 1968 年费根鲍姆等人成功研制第一个用于质谱仪分析有机化合物分子结构的专家系统以来，材料设计专家系统已获得迅速发展，广泛应用于材料科学研究的各个方面。传统的材料设计专家系统主要有下列几个模块：优化模块、集成化模块和知识获取模块。现在逐步在发展智能专家网络系统，这是以模式识别和人工神经网络为基础的专家系统。目前基于人工神经网络的处理技术在材料科学中得到了越来越多的应用，在处理规律不明显、组分变量多、非线性方面的问题具有特殊的优越性，并且也可以对建立的数学模型和计算结果进行验证。

1.3.4 计算机技术用于材料设计

材料设计的思想源于 20 世纪 50 年代，是指通过理论分析与计算预报新材料的组分、结构及性能，进而通过理论设计来“定做”具有特定性能的新材料。长期以来，材料设计主要采用依据大量的试验，进行大面积筛选的方法，这势必消耗大量的人力、物力和时间。同时，由于大量尚未理论化的经验和试验规律的存在，在相当长的一段时间内，人们还不可能完全脱离经验和不进行探索性试验来进行纯理论的材料设计。因此，理论辅助和试验验证相结合的材料设计方法便成为人们探讨的重点。目前，随着计算机技术的发展，将先进的计算机技术应用于材料设计，可以用较少的试验获得理想的材料设计结果。

材料设计一般可分为三个层次：微观设计层次，尺度约 1mm 数量级，是电子、原子、分子层次的设计；介观设计层次，尺度约 $1\mu\text{m}$ 数量级，材料被看做是连续介质，是组织结构层次的设计；宏观设计层次，尺度对应于宏观材料，涉及大块材料的成分、组织、性能和应用的设计研究，是工程应用层次的设计。不同层次所用的理论及方法是不同的，不同层次之间常常相互交叉，不同层次的目的、任务及应用也不尽相同。

1.3.5 计算机技术用于材料性能表征与检测

材料性能的测定大多使用专门的测试设备和仪表。有时为了测定某些较为特殊的性能，也常用一些通用的测试设备和仪表组成比较复杂的测试系统。在组建的测试系统中，如果使用计算机来控制整个系统，使其协调运行，进行数据采集和数据处理，通常都能使整个系统的功能得到飞跃性的增强。计算机化的材料性能测试系统（CAT 系统）是提高材料研究水