

普通高等教育材料科学与工程专业规划教材

Jisuanji Zai
Cailiao Kexue Zhongde Yingyong

计算机 在材料科学中的应用

天津大学 许鑫华 主编
武汉理工大学 叶卫平

 机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS



普通高等教育材料科学与工程专业规划教材

计算机在材料科学中的应用

主编 许鑫华 叶卫平
参编 黄 远 何小于 师春生
原续波 郭瑞松
主审 左演声



机械工业出版社

本书立足“材料学”一级学科，系统地介绍了计算机技术及网络技术
技术在材料科学研究中的应用，使读者初步掌握在材料科学研究领域
中更好地应用计算机的思路、方法和原理。在加强读者对基础知识、
基本方法掌握的基础上，结合材料科学研究领域的新方法、新技术中
计算机的应用，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。

全书共分九章，介绍了材料科学研究中数学模型的建立方法、常
用的数值分析方法和主要物理场的数值模拟；材料行为工艺的计算机
模拟；材料数据库和专家系统与新材料、新合金的计算机辅助设计；
材料加工过程的计算机控制、计算机在材料性能检测方面的应用；材
料科学研究中计算机数据和图像分析、处理方法；互联网在材料科学
研究中的应用等。本书可作为材料科学与工程专业本科生专业基础课
教材，也可供从事材料研究、开发和应用的工程技术人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在材料科学中的应用/许鑫华、叶卫平主编. —北京：机械工
业出版社，2003.3

普通高等教育材料科学与工程专业规划教材

ISBN 7-111-11773-5

I. 计… II. ①许…②叶… III. 计算机应用—材料科学—高等
学校—教材 IV. TB3-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2003) 第 015259 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

责任编辑：张祖凤 版式设计：霍永明 责任校对：张晓蓉

封面设计：张 静 责任印制：闫 焱

北京瑞德印刷有限公司印刷·新华书店北京发行所发行

2003 年 4 月第 1 版第 1 次印刷

1000mm × 1400mm B5 · 9.75 印张 · 377 千字

定价：25.00 元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

本社购书热线电话 (010) 68993821、88379646

封面无防伪标均为盗版

前 言

计算机作为一种现代工具在材料科学研究与工程中的应用越来越广泛，极大地促进了材料科学研究的深入和发展。本书系统地介绍了计算机技术及网络技术在材料科学研究中的应用，使读者初步掌握在材料科学研究领域中更好地应用计算机的思路、方法和原理。本书力图突出以下特点：

1) 立足“材料学”大专业，加强读者对基础知识、基本方法的掌握，重在计算机的应用。在内容上既考虑材料学专业各研究方向的共性，又兼顾材料科学研究领域的广泛性和与多学科的相互渗透性给计算机在材料科学中的应用带来的特殊性和复杂性。

2) 计算机毕竟只是工具。本课程学习的目的在于利用这一工具解决具体问题。试图通过计算机在材料科学研究中的应用实例，加强学生利用计算机解决实际问题的能力培养。

3) 结合材料科学领域的新方法、新技术中计算机的应用，培养和引导学生的创新意识。

本书共分九章，深入浅出地介绍了材料研究中数学模型的建立方法、常用的数值分析方法和主要物理场的数值模拟；材料行为工艺的计算机模拟；材料数据库和专家系统与新材料、新合金的计算机辅助设计；材料加工过程的计算机控制、计算机在材料性能检测方面的应用；材料科学研究中的计算机数据和图像分析、处理方法；互联网在材料科学研究中的应用等。在选材、内容、组织和编排等方面力图保持全书的系统性和新颖性。本书可作为材料科学与工程本科专业基础课教材，也可供从事材料研究、开发和应用的工程技术人员参考。

考虑到不同学校先导课程及教学进度不同、本课程的学时不同、学生的计算机和材料专业基础知识水平参差不齐，本教材在编写中，既注意了基础知识的介绍和理论水平的探讨，又注重实践中的应用介绍，各章节内容涉及面比较广，教师可根据实际需要选用。为保证本书的系统性、实用性和可读性，书中各章介绍的有关知识为后续内容的阅读理解作了铺垫，这些内容在教学中可根据具体情况适当增删，便于学生掌握和理解。本书另配有教学参考光盘，将由机械工业出版社出版。

本书由天津大学许鑫华和武汉理工大学叶卫平主编。其中第一至第三章由天津大学黄远、师春生编写，第四、五章由武汉理工大学叶卫平编写，绪论及第六、九章由天津大学许鑫华编写，第六章的第三节的二、三部分和第七章由武汉

理工大学何小于编写，第八章数据处理部分由天津大学郭瑞松编写、图像处理部分由天津大学原续波编写。全书由北京工业大学左演声主审。

本书主要结合作者在材料科学研究各领域的教学、科研的实践和理解，参考文献资料编写而成。书中大部分内容已经过几年的教学使用。各章末尾列出了主要参考文献，由于条件限制，可能未将所有参考文献一一列出，在此对所有参考文献的作者表示衷心的感谢！在本书编写过程中，得到了天津大学、武汉理工大学的大力支持，天津大学研究生韩波、傅英松参加了部分资料的整理和绘图工作，在此一并表示感谢！

由于计算机在材料科学研究领域中应用非常广泛，且计算机技术的发展日新月异，在材料科学应用中的新方法、新应用不断出现，加之编者学识有限，书中难免有不当之处，敬请读者批评指正。

编 者

2003年1月

目 录

前言

绪论 1

- 一、计算机用于新材料的设计 2
- 二、材料科学研究中的计算机模拟 3
- 三、材料工艺过程的优化与自动控制 5
- 四、计算机用于数据和图像处理 5
- 五、计算机网络在材料研究中的应用 6

第一章 材料科学研究中的 数学模型 7

- 第一节 数学模型基础 7
 - 一、基本概念 7
 - 二、数学模型分类 8
 - 三、数学模型的作用 9

第二节 建立数学模型的一般步骤和原则 10

- 第三节 常用的数学建模方法 14
 - 一、理论分析法 14
 - 二、模拟方法 16
 - 三、类比分析法 20
 - 四、数据分析法 22
- 参考文献 24

第二章 材料科学研究中 常用的数值分析方法 25

- 第一节 有限差分法 25

- 一、概述 25
- 二、差分方程的建立 25
- 三、差分方程的求解方法 28
- 四、计算误差分析 31
- 五、有限差分法解题示例 32

第二节 有限元法 34

- 一、有限元法的基本概念——直接刚度法 35
- 二、有限元法的基本理论 42
- 三、有限元程序的结构和特点 46
- 四、有限元软件简介 47
- 五、ANSYS 程序使用介绍 48

参考文献 60

第三章 材料科学研究中 主要物理场的数值 模拟 61

- 第一节 温度场的计算 61
 - 一、导热方程 61
 - 二、初始条件与边界条件 62
 - 三、平面温度场的有限差分求解 63
 - 四、有限元法求解 68

- 第二节 应力场计算 83
 - 一、弹性力学基础知识 83
 - 二、弹性问题分析 85
- 第三节 浓度场计算 91
 - 一、扩散控制方程 91
 - 二、数值解法 92
- 参考文献 94

第四章 材料科学与行为工 艺的计算机模拟 95

- 第一节 组织转变的

计算机模拟	95	四、数据库数据主要特征	115
一、TTT 和 CCT 曲线	95	五、工程数据库的应用	116
二、采用连续冷却转变		第二节 材料科学与工程	
(CCT) 曲线模拟	96	数据库	117
三、采用等温转变		一、材料数据库的发展	117
(TTT) 曲线模拟	97	二、材料数据库的应用举例	119
四、模拟程序设计	99	第三节 专家系统	128
五、现状和发展	100	一、专家系统的历史和发展	128
第二节 计算机相平衡		二、专家系统的工作原理	129
计算方法	101	三、专家系统的类型	130
一、热力学模型	101	四、典型专家系统分析	130
二、计算平衡相组成和绘制		第四节 人工神经网络技术	136
相图	102	一、人工神经网络	136
第三节 相图计算发展历程和		二、神经网络的学习	
计算软件介绍	105	方法及规则	139
一、相图计算的过程和特点	105	三、误差反传神经网络构成	
二、相图计算软件介绍	106	和学习方法	139
三、用 Thermo-Calc 系统计算		第五节 人工神经网络在材料	
相图举例	107	科学中的应用	141
第四节 计算机模拟在材料		一、用人工神经网络方法实现	
科学中的应用	111	材料设计与优化	141
一、材料的组成和结构与		二、人工神经网络实现材料	
计算机模拟	111	工艺优化	145
二、金属材料加工与		三、人工神经网络实现材料	
计算机模拟	111	性能预测	146
三、塑料加工中的计算机模拟	112	四、基于人工神经网络的材料	
四、计算机工艺模拟发展特点	112	智能加工与智能控制	147
参考文献	113	参考文献	148
第五章 材料数据库和新材		第六章 材料加工过程的	
料、新合金的		计算机控制	150
设计	114	第一节 计算机控制	
第一节 数据库系统的		技术基础	150
组成与结构	114	一、计算机控制系统的概念	150
一、数据库系统概述	114	二、计算机工业控制系统的基本	
二、数据库管理系统	114	功能及其结构与组成	157
三、数据库系统结构	115	三、计算机工业控制系统中	

计算机的分类和选择	159	一、磁性测量中的计算机	
四、计算机控制系统的主要		数据处理	204
特点和基本要求	162	二、超导材料特性曲线	
第二节 计算机控制系统		计算机测量	206
的输入与输出	163	三、金属熔点附近热物性参数	
一、检测技术	164	的计算机测量	208
二、控制仪表与装置	165	参考文献	210
三、输入输出过程通道	168		
第三节 材料加工的计		第八章 材料科学研究中的	
算机控制	171	数据与图像处理	211
一、高分子材料加工的		第一节 材料研究中的	
计算机控制	171	数据处理	211
二、金属材料加工的计算		一、Origin 软件的基本功能和	
机控制	179	使用方法	211
三、无机非金属材料烧成的		二、Origin 在材料科学研究中	
计算机控制	183	的应用举例	225
参考文献	185	三、材料研究科学中的	
		数据处理	233
第七章 计算机在材料检测		四、结语	234
中的应用	186	第二节 材料科学研究中的	
第一节 材料成分的检测	186	计算机图像分析与	
一、分析电子显微方法	186	处理	235
二、各种光谱仪方法	188	一、图像与图像处理	236
第二节 材料组织结构的		二、数字图像的获得途径	236
检测	190	三、采用常规软件进行材料	
一、金相图像分析系统	190	图像分析与处理	237
二、材料缺陷的计算机评定	195	四、粒径大小测定原理	247
三、材料显微组织的计算机		五、粒径分析中的图像处理	
仿真	198	方法及算法	251
第三节 材料力学性能的		六、粒径数据作图与分析	252
检测	199	七、图像处理在材料研究	
一、万能材料试验机的计算机		中的应用举例	253
辅助测试系统	200	参考文献	258
二、专项实验设备的计算机			
数据采集和处理系统	202	第九章 互联网在材料科学	
第四节 材料物理性能的		研究中的应用	259
测量	204	第一节 Internet 概论	259
		一、Internet 简介	259

二、Internet 的基本概念和技术	261
三、Internet 的应用	263
第二节 互联网上材料科学 信息资源的检索和 利用	265
一、搜索引擎	265
二、材料科学专业网站	268
三、数据库资源	279

第三节 材料科学文献检索	284
一、索引数据库检索	285
二、全文数据库检索	291
参考文献	298

附录 NiO-MgO 二元相图计算 程序	299
-------------------------	-----

绪 论

材料是人类生产和生活水平提高的物质基础，是人类文明的重要支柱和进步的里程碑。材料的进步取决于社会生产力和科学技术的进步，同时材料的发展又推动了社会经济和科学技术的发展。人类的文明史也是一部材料发展史，社会发展历史有一种就是以材料来划分的。但人类在漫长的历史发展中大都是依靠自然的恩赐，仅仅停留在利用天然材料的状态。自 19 世纪以来由于科学技术的进步，生产不断发展，对材料不断提出新要求，有些要求完全超出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到创造的转变，对材料的认识也逐渐由匠人的经验发展到形成一门科学。尤其是在 20 世纪下半叶逐渐形成的以新材料技术为基础的信息技术、新能源技术、生物工程技术、空间技术和海洋开发技术的新技术群，更使材料科学得到飞速发展。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 年代又把新型材料、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，人们已逐渐掌握了材料的组成、结构和性能之间的内在关系，能够按照使用要求对材料性能进行设计创造。

著名科学家钱学森曾指出：“现在材料科学已经发展到一旦有了设计就能把材料造出来，这就给我们提出了一个新的可能，我们可以让工程设计人员、力学工作者和材料工作者一道再加上电子计算机，把一项工程一直设计到细观或微观的水平。这个新的发展将大大提高将来工程设备的使用效能。”目前蓬勃发展的新材料技术就是用原有的金属材料、无机非金属材料和高分子材料等作为组分，通过一定的工艺方法将它们复合在一起，制成既能保留原有材料组分的特性，又可克服组分材料的不足，并还能显示出某些新的性能的材料。新材料技术的出现是近代材料科学的伟大成就，也是材料设计技术的一个重大突破。

材料的分类方法很多，根据其组成与结构可分为金属材料、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、能源材料、电子材料、耐火材料、医用材料和耐蚀材料等。

与其他事物的发展一样，材料的发展经历了由简单到复杂，由以经验为主到以科学知识为主，逐步形成了独立的材料科学与工程学科。就研究材料整体而言，它成为一门学科还是近几十年的事。由于材料的获得、质量的改进和使材料

成为人们可以使用的器件和部件都离不开生产工艺和制造技术等工程知识，故人们通常将“材料科学”与“工程”相提并论，称为“材料科学与工程”。

材料科学与工程是研究材料组成、结构、性能、制备工艺和使用性能以及它们之间相互关系的科学。研究的内容包括：材料的组织、结构、杂质、缺陷与性能的关系，材料的形成机理和制备方法，材料在加工、使用过程中的变化和失效机理，材料性能的测试和材料的工程应用等。

材料的性质是材料对电、磁、光、热、机械载荷的反应，而这些性质主要取决于材料的组成与结构。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，有些材料在实验室环境下表现出很好的性能，但在特定的使用条件下，如氧化与摩擦、疲劳及其他复杂载荷条件下，就不能满足使用要求。此外，使用性能还包括可靠性、耐用性、寿命预测和延寿措施。

材料的合成与制备过程内容很多，包括传统的冶炼、制粉、压力加工和焊接等，也包括各种新发展的真空溅射、气相沉积等新工艺；从微观水平到宏观产品，从制备高纯度单一元素到多种材料复合，各种化学的、物理的、机械加工的方法均应综合应用，这对实现新材料的生产应用往往有着决定性的影响。

材料科学是多学科交叉的新兴科学。它与许多基础学科有着不可分割的联系，如固体物理学、电子学、光学、声学、固体化学、量子化学、有机化学、无机化学、数学与计算机技术等。

材料科学实质上还是一门发展不成熟的学科。目前对它的研究很大程度上还依赖于事实和经验的积累，系统的研究材料还有一个很长的过程。正是由于以上这些特点，使得计算机在材料科学的研究中起着举足轻重的作用。

计算机作为一种现代工具，在当今世界的各个领域日益发挥巨大作用。它已渗透到各门学科领域以及日常生活中成为现代化的标志。自 20 世纪 40 年代计算机诞生起，它就改变了各个科学领域的面貌。在材料领域，计算机也正在逐渐成为极为重要的工具，例如，它可以帮助材料专家设计和分析新材料、制造新合金、完成原本极为复杂的材料设计。最近几年，材料科学随着各种技术的更新而出现了高速发展的趋势，计算机在材料科学中的应用正是材料科学飞速发展的主要原因之一。

一、计算机用于新材料的设计

“材料设计”的设想始于 20 世纪 50 年代，是指通过理论与计算预报新材料的组分、结构与性能，或者是通过理论设计来“订做”具有特定性能的新材料，按生产要求“设计”最佳的制备和加工方法。20 世纪 80 年代，随着计算机技术的飞速发展，实现这一目标的条件渐趋成熟。

材料设计按照设计对象和所涉及的空间尺寸可分为电子层次、原子/分子层次和显微结构层次。前两个尺寸涉及材料的原子排列及电子结构，称为材料的微

观结构设计；对于空间尺度大于 $1\mu\text{m}$ 的对象，在设计中则不考虑材料内个别原子分子的行为，而采用连续介质模型进行处理。材料微观结构设计的发展建立在基础理论的完善和发展、计算机信息处理技术的建立和发展、先进的材料生产和制备的发展之上。物理学和化学的发展，特别是固体理论、量子化学和化学键理论的发展，使人们对材料的结构和性能的关系有了系统了解，对材料制备、加工和使用过程中的物理化学变化也有了较深的认识，这就为材料设计打下了理论基础。同时人工智能、模式识别、计算机模拟、知识库和数据库等技术的发展，使人们能将物理、化学理论和大批杂乱的实验资料沟通起来，用归纳和演绎相结合的方式对新材料研制做出决策，为材料设计的实施提供了行之有效的技术和方法。以材料数据库和知识数据库为基础，构建了多种类型的材料设计专家系统，为材料的设计提出了有力的工具。先进的材料制备技术如急冷（Splat Cooling）、分子束外延（MBD）、有机金属化合物气相沉积、离子注入、微重力制备等，可制出过去不能制备的“人造材料”（Artificial Materials），如超晶格、纳米相、亚稳相、准晶等，为材料设计开拓了新的应用园地，将传感器、人工智能技术、自控技术相结合，发展材料的智能加工（Intelligent Processing），为材料制备和加工方法的优化设计开辟了新方向。

当前，国际上的材料数据库正朝着智能化和网络化的方向发展。世界上几乎所有的发达国家都已经相继建成了国家级的科研和教育计算机网络，并在此基础上互联成覆盖全球的国际性计算机网络。科学工作者可以利用网络进行学术交流，人们可以通过个人计算机作为终端直接使用远程的大型计算机来解决自己的计算问题和共享数据资源。网络数据库将给科研工作者进行材料设计提供更加便利和快捷的服务。

二、材料科学研究中的计算机模拟

利用计算机对真实的系统进行模拟“实验”、提供实验结果、指导新材料研究，是材料设计的有效方法之一。材料设计中的计算机模拟对象遍及从材料研制到使用的全过程，包括合成、结构、性能、制备和使用等。随着计算机技术的进步和人类对物质不同层次的结构及动态过程理解的深入，可以用计算机精确模拟的对象日益增多。在许多情况下，用计算机模拟比进行真实的实验要快、要省，因此可根据计算机模拟结果预测有希望的实验方案，以提高实验效果。

计算机模拟是一种根据实际体系在计算机上进行的模型实验。通过将模拟结果与实际体系的实验数据进行比较，可以检验模型的准确性。也可以检验由模型导出的解析理论所作的简化近似是否成功。在模型体系上获得的微观信息常常比在实际体系上所做的实验更为详细。在某些情况下，计算机模拟可以部分地代替实验。此外，计算机模拟对于理论的发展也有重要的意义，它们为现实模型和实验室中无法实现的探索模型作详细的预测而提供方法，如材料在极端压力或温度

下经历相变的四维体系；再如材料科学中一些发展极快的过程，用现有的测试技术无法监测的问题，也可以借助计算机模拟技术进行详尽的研究，从而超越过去只能根据过程的最终状态的测试结果进行推论的传统研究方法的局限。

目前，美国 BIOSYM Technologies 公司已经研制出多套材料的计算机模拟软件，如电子、光学和磁性材料的模拟软件（Software for Electron, Optical and Magnetic Materials Simulation, 简称 EOM），固态化学研究软件（Software for Solid State Chemistry Research），模拟无机材料的结构和性能的软件（Simulating the Structures & Properties of Inorganic Materials），聚合物体系的性能预测和分析软件（Property Prediction & Analysis of Polymer Systems）等。应用这些软件，已经解决了不少实际问题。总之，计算机模拟在材料科学中已被证明是一个不可估价的研究工具，有人直接称材料科学中的计算机模拟为计算机材料科学。

1992 年末，关于计算机模拟的两本专业性杂志问世。一本是 IOP (Institute of Physics Publishing) 出版的“Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering”，另一本是由 Elsevier Science Publishers B.V. 出版的“Computational Materials Science”。这也是材料科学领域正面临一场研究方法变革的重要标志之一。

材料研究的分析和建模按传统方法可大致分为三类不同的领域，是由所考察材料的性质在什么尺度上划分的。被凝聚态物理学家和量子化学家处理的微观尺度范围是最基本的模型，此时材料的原子结构起显著作用，一类是在唯象的层次上，许多最复杂的分析在中间尺度上进行，即连续模型。最后是宏观尺寸，此时大块材料的性能被用作制造过程及使用模型的输入量。历史上，这三种层次的研究被不同领域的科学家——应用数学家，物理学家，化学家，冶金学家，陶瓷学家，机械工程师，制造工程师等分别进行。

由于材料性质的研究是在不同尺度层次上进行的，计算机模拟也可根据模拟对象的尺度范围而划分为若干层次。一般说，可分为电子层次（如电子结构）、原子分子层次（如结构、力学性能、热力学和动力学性能）、微观结构层次（如晶粒生长、烧结、位错、极化和织构等）以及宏观层次（如铸造、焊接、锻造和化学气相沉积）等。它们对应的空间尺度大致为 $0.1 \sim 1\text{nm}$ ， $1 \sim 10\text{nm}$ ， $\sim 1\mu\text{m}$ 以及 $1\mu\text{m}$ 以上的尺度。正因为计算机模拟技术可以从微观上研究原子间的相互作用，对于一些现有的观测手段无法直接观察到的过程，如各种组织形成的规律、凝固过程、非晶态的形成、固态相变中原子间的相互运动和晶体缺陷及其运动、晶界构造、裂纹的产生和扩展过程等问题都可以用计算机模拟方法进行透彻的研究。

对于空间尺度大于 $1\mu\text{m}$ 的材料对象，模拟时已不用考虑材料中个别原子分子的行为，而采用所谓“连续介质模型”（如材料的弹/塑性、断裂力学、扩散、热传输和相变等）。对于更大的空间尺度，则涉及材料的工程模拟和使用中的行

为模拟（如寿命预测、环境稳定性和老化等）。

由于巨型计算机的应用，当用于规则（或非常接近规则）的结晶固体时，利用计算机已经达到了定量预测的能力。最新的进展表明有可能以相似的精度描述诸如缺陷附近的晶体形变、表面和晶粒边界的非规则图像。新的方法甚至有可能用于研究物质的亚稳态或严重无序状态。最近，已经提出总能量从头算起的新方法，能用现今已有的计算机处理原子的较大排列，如在一个超晶胞中有 50 ~ 100 个原子。实际上，如果新的从头算起方法能达到预期的精度，大批的材料问题将转为定量的问题。

计算机模拟已应用在材料科学的各个方面，包括分子液体和固体结构的动力学、水溶液和电解质、胶态分子团和胶体、聚合物的结构、力学和动力学性质、晶体的复杂结构、点阵缺陷的结构和能量、超导体的结构、沸石的吸附和催化反应、表面的性质、表面的缺陷、表面的杂质、晶体生长、外延生长、薄膜的生长、液晶、有序-无序转变、玻璃的结构、粘度、蛋白质动力学、药物设计等。

三、材料工艺过程的优化及自动控制

材料加工技术的发展主要体现在控制技术的飞速发展。微型计算机和可编程控制器在材料加工过程中的应用正体现了这种发展和趋势。在材料加工过程中应用计算机不仅能减轻劳动强度，而且能改善产品质量和精度，提高产量。

用计算机可以对材料加工工艺过程进行优化控制。如在计算机模拟和对工艺过程的数学模拟进行研究的基础上，可以用计算机对渗碳、渗氮全过程进行控制，可以用计算机精密控制注塑机的注射速度。计算机技术和微电子技术、自动控制技术相结合，使工艺设备、检测手段的准确性和精确度等大大提高。以在热处理中的应用为例，计算机首先应用于炉温控制，其后迅速扩展到气氛控制，真空热处理控制，气体渗碳、渗氮控制，离子化学热处理控制，激光热处理的控制，渗碳、淬火、清洗和回火的整个生产过程的控制等。控制技术也由最初的简单顺序控制发展到数学模型在线控制和统计过程控制，由分散的个别设备的控制发展到计算机综合管理与控制，控制水平提高，可靠性得到充分保证。

四、计算机用于数据和图像处理

材料科学研究在实验中可以获得大量的实验数据，这是材料科学研究中获得的第一手、也是非常重要的原始数据。借助计算机的存储设备，可以保存大量的数据，同时又特别方便后续用计算机对数据进行处理（计算、绘图、拟合分析等）和快速查找。目前，用于数据管理、分析以及绘图的软件很多，有些功能非常强大，有的虽相对简单，但比较专业化。

材料性能与其结构有着密不可分的关系，这些结构包括一种材料的原子组成、分子结构以及在此基础上形成的凝聚态结构。这些结构中及使用性能直接相关的是凝聚态结构（如材料的晶体结构将对其力学性能产生很大影响），其研究

手段之一是光学显微镜和电子显微镜技术。这些技术往往以二维图像方式表述材料的凝聚态结构，如何从这些图像中获取有用的结构信息，如晶体的大小、分布、聚集方式等，并将这些信息与材料性能相联系，是材料研究中非常重要的内容，而对图像的分析离不开计算机的应用。

五、计算机网络在材料研究中的应用

材料科学是一门综合性的学科，它所涉及的领域几乎涵盖整个科学研究的所有基础领域。借助于 Internet，从事研究材料的科学工作者可以相互交流，及时了解材料科学的发展动向，阅读各种相关杂志的电子版，查找已发表的论文，建立 Web 页面介绍自己的研究成果等。这种新的研究手段正成为材料科技工作者手中的一种工具，可以极大简化文献检索的繁琐，更快、更准确地获得需要的材料科学研究信息。

由于互联网上信息浩如烟海，为了解决在网上查询信息的困难，各类搜索引擎应运而生。它们将国际互联网上的网站进行分类，并且提供关键词查询工具。因此，熟练掌握搜索引擎的使用技巧，学会材料科学信息资源的检索方法十分必要。

上面所提到的只不过是计算机在材料科学研究应用中很少一部分内容，计算机在材料科学研究中的应用还在不断的发展中，需要大家在今后的学习和工作中不断的理解、体会。

第一章 材料科学研究中的数学模型

现代科学技术发展的一个重要特征是各门科学技术与数学的结合越来越紧密。数学的应用使科学技术日益精确化、定量化，科学的数学化已成为当代科学发展的一个重要趋势。数学模型是数学科学连接其他非数学学科的中介和桥梁，它从定量的角度对实际问题进行数学描述，是对实际问题进行理论分析和科学研究的有力工具。数学建模是一种具有创新性的科学方法，它将现实问题简化，抽象为一个数学问题或数学模型，然后采用适当的数学方法求解，进而对现实问题进行定量分析和研究，最终达到解决实际问题的目的。计算机技术的发展为数学模型的建立和求解提供了新的舞台，极大地推动了数学向其他技术科学的渗透。

材料科学作为 21 世纪的重要基础科学之一同样离不开数学。通过建立适当的数学模型对实际问题进行研究，已成为材料科学研究和应用的重要手段之一。从材料的合成、加工、性能表征到材料的应用都可以建立相应的数学模型。有关材料科学的许多研究论文都涉及到了数学模型的建立和求解，甚至产生了一门新的边缘学科——计算材料学（Computational Materials Science），正是这些数学手段才使材料研究脱离了原来的试错法（Trial or Error）研究，真正成为一门科学。

本章将介绍数学模型的基本概念，建立数学模型的基本步骤、原则和方法，同时给出一些与材料科学有关的具体建模实例。

第一节 数学模型基础

一、基本概念

科学的发展离不开数学，数学模型在其中又起着非常重要的作用。无论是自然科学还是社会科学的研究都离不开数学模型。

虽然我们还没有将数学模型作为一门课程来学习过，但实际上，在已经学习过的其他课程中已经多次接触到了数学模型。在物理学中，最典型的莫过于力学中的牛顿三定律。在物理化学中的热力学定律，在电子学中反映电路理论的基本规律的基尔霍夫定律，都是最精美的数学模型。此外在社会科学领域也存在着大量的数学模型，如马尔萨斯的人口模型、马克思的描述再生产基本规律的数学模型。这些反应某一类现象客观规律的数学式子就是这些现象的数学模型。

那么，怎样给数学模型下一个定义呢？

我们通常把客观存在的事物及其运动形态统称为实体，模型则是对实体的特

征及其变化规律的一种表示或抽象。数学模型就是利用数学语言对某种事物系统的特征和数量关系建立起来的符号系统。

数学模型有广义理解和狭义理解。按广义理解：凡是以相应的客观原型（即实体）作为背景加以一级抽象或多级抽象的数学概念、数学式子、数学理论等都叫做数学模型。按狭义理解：那些反映特定问题或特定事物系统的数学符号系统就叫做数学模型。在应用数学中所指的数学模型，通常是按狭义理解的，而且构造数学模型的目的仅在于解决具体的实际问题。

数学模型是为一定的目的对客观实际所作的一种抽象模拟，它用数学公式、数学符号、程序、图表等刻画客观事物的本质属性与内在联系，是对现实世界的抽象、简化而又本质的描述。它源于实践，却不是原型的简单复制，而是一种更高层次的抽象。它能够解释特定事物的各种显示形态，或者预测它将来的形态，或者能为控制某一事物的发展提供最优化策略，它的最终目标是解决实际问题。

二、数学模型的分类

数学模型按照不同的分类标准有着多种分类。

1) 按照人们对实体的认识过程来分，数学模型可以分为描述性数学模型和解释性数学模型。

描述性模型是从特殊到一般，从分析具体客观事物及其状态开始，最终得到一个数学模型。客观事物之间量的关系通过数学模型被概括在一个具体的抽象的数学结构之中。

解释性模型是由一般到特殊，从一般的公理系统出发，借助于数学壳体，对公理系统给出正确解释。

2) 按照建立模型的数学方法分，可以分为初等模型、图论模型、规划论模型、微分方程模型、最优控制模型、随机模型、模拟模型等。

初等模型指采用简单而且初等的方法建立问题的数学模型，该模型容易被更多的人理解接受和采用，更有价值。该模型包括代数法建模、图解法建模等。

图论模型指的是根据图论的方法，通过由点和边组成的图形为任何一个包含了某种二元关系的系统提供一个数学模型，并根据图的性质进行分析。如物质结构都可用点和边连接起来的图来模拟，有机化合物的分子结构、同分异构体的计算问题均可用图论中的树来研究。

微分方程模型指的是在所研究的现象或过程中取一局部或一瞬间，然后找出有关变量和未知变量的微分（或差分）之间的关系式，从而获得系统的数学模型。微分方程模型在材料研究中应用很广泛，如材料中的扩散问题、材料电子显微分析中的衍衬运动学、衍衬动力学理论等。

随机模型是根据概率论的方法讨论描述随机现象的数学模型。例如描述炮弹的运动轨迹和着弹点的数学模型、描述高分子材料链式化学反应的数学模型、多