

材料新技术丛书

材料科学中的计算机应用

Computer Technology Applied in Material Science

乔 宁 编著



中国纺织出版社

内 容 提 要

本书系统地介绍了各种计算机技术在材料科学研究中的应用,主要内容有材料科学实验数据处理方法、实验数据图形图像处理软件的使用方法、人工智能技术在材料科学中的应用、利用互联网进行材料科学文献资源共享、材料科学中计算机辅助教学的应用等。本书属于应用型书籍,重点不在阐述计算机理论知识,而在于强调内容的实用性。

本书适合从事材料科学研究、开发和应用的工程技术人员阅读,也可以作为材料学专业本科生和研究生的参考书籍。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学中的计算机应用 杨宁编著. —北京:中国纺织出版社, 2004.12

(材料新技术丛书)

ISBN 7-5066-5842-9

I.材... II.杨... III.计算机应用—材料科学 IV.刘月娥

中国版本图书馆CIP数据核字(2004)第158885号

策划编辑 朱萍萍 责任编辑 陈瑶芳 特约编辑 任鸿频
责任校对 陈瑶红 责任设计 李瑶然 责任印制 何瑶艳

中国纺织出版社出版发行

地址 北京东直门南大街2号 邮编 100027

邮购电话 010-64015005 传真 010-64015005

网址: <http://www.c-textile.cn>

北京老舍茶馆早岳 精英出版

中国纺织出版社印刷厂印刷 三河市永成装订厂装订

各地新华书店经销

2004年12月第1版第1次印刷

开本 880mm×1230mm 1/32 印张 15.5

字数 360千字 印数 1—5000 定价 28.00元

ISBN 7-5066-5842-9

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社市场营销部调换

前摇言

新材料、能源、信息是当代文明的三大支柱,新材料已列为国家 21 世纪优先发展的重点。现代材料科学正在发生深刻的变化,其突出特征表现在:学科之间相互交叉渗透,使得各学科之间的关系日益密切,互相促进,难以分割。现代技术(如微电子、计算机等)的新成果也往往和材料科学与工程的发展交织在一起。作为一种现代工具,计算机在材料科学与工程中的应用越来越广泛。目前,材料科学行业除了利用计算机和网络技术进行文献检索与资源共享外,还将计算机技术应用到了材料性能检测、新材料合成设计、计算机辅助分析、计算机检测和控制、数据库与专家系统等领域,在这些方面引入计算机技术,极大地促进了材料科学研究的深入和发展。

本书从实用角度出发,系统地介绍了计算机技术在材料科学研究中的应用,每一章除了介绍计算机技术的基础知识外,均引入了材料科学研究中的实例(其中大部分实例是编者实践过的内容)。全书共分七章,第一章概述部分除了介绍计算机技术和新材料技术的发展以及计算机在材料科学中应用的各个方面外,还着重介绍了学科交叉点——计算材料学的起源和发展,以开阔读者的视野。第二章介绍了常用的数值计算方法,包括方程和方程组的求解、插值法和回归分析等内容,每种方法均给出

了编制好的程序(已调试)。第三章为数据的图形图像处理软件,除主要介绍常用的数据处理软件——~~精通~~和~~韵理~~的用法外,还通过在材料科学中的应用实例使读者从实用角度认识软件。第四章介绍了专家系统的概念、结构及开发方法,并以金属材料腐蚀咨询系统与材料缺陷分析系统两个专家系统实例,强调了专家系统的实用性。第五章人工神经网络在材料科学中的应用,主要介绍人工神经网络的结构和类型,着重于材料科学研究中常用的~~神经网络模型~~模型,并以其在材料科学中应用实例使读者掌握~~神经网络模型~~模型的使用方法。第六章介绍了网络技术,特别是~~网络~~的发展对材料科学研究的作用,主要从材料科学专业网站、搜索引擎、材料数据库等角度出发,使读者了解和掌握如何应用网络技术进行材料科学文献的查阅工作。第七章计算机在材料科学教学中的应用,主要介绍了~~课件~~课件的制作技术,适合材料学研究方面的教师阅读。

本书在选材、内容、组织和编排等方面力求做到系统性和新颖性,选用的实例均为近年来材料科学研究的热点。编者一直从事材料科学的教学和科研工作,主要的研究方向为计算机在材料科学方面的应用,本书便是结合了编者在实际工作中的实践内容,另外参考了大量近年来国内外发表的计算机应用文献内容。书中介绍的软件部分为商业性软件,但更多的是提供共享版的免费软件。

计算机技术已经涉及材料科学的方方面面,内容丰富,需要进一步研究的问题很多,本书很难给出一个全面的介绍。另外由于编者的水平有限,书中的错误和不妥在所难免,敬请读者指正。

乔宁

2002年 缘月于北京

目录

第一章概述	1
第一节计算机技术的发展	员
一、计算机软硬件技术的发展	员
二、网络技术的发展	猿
第二节材料科学技术的发展	源
一、材料科学的发展	缘
二、未来材料科学发展趋势	缘
第三节学科交叉点——计算材料学概述	苑
一、计算材料学研究的主要内容	愿
二、计算材料学研究的主要途径	苑
第四节计算机在材料科学中的应用	缘
一、数值计算与模拟	苑
二、数据与图像处理	苑
三、计算机管理与控制	苑
四、人工智能	怨
五、其他应用	园

第二章 数值计算	22
第一节 综述	圆
一、解题步骤	圆
二、算法简介	圆
三、误差	圆
第二节 代数方程求解应用	圆
一、代数方程的求解	圆
二、解线性方程组的方法	猿
第三节 插值法——实验数据的拟合	源
一、线性插值	缘
二、一元三次 插值	缘
三、插值法注意事项	缘
第四节 回归分析——实验模型参数的确定	缘
一、一元线性回归分析	远
二、加权最小二乘法	远
三、一元非线性回归	苑
第三章 数据与图形图像处理	77
第一节 数据处理软件—— 造	苑
一、 造介绍	苑
二、 造的操作基础	苑
三、利用 造进行数据处理实例	怨
四、 造小结	员
第二节 科学计算绘图软件—— 理	员
一、 理概述	员
二、 理数据处理基础	员

三、数据绘图	页码
四、韵理在材料科学中的应用实例	页码
第三节常用图形图像软件	页码
一、孕理常用图像处理软件	页码
二、分子绘图软件	页码
 第四章专家系统在材料科学中的应用	129
第一节专家系统概述	页码
一、什么是专家系统	页码
二、专家系统的产生和发展	页码
三、专家系统的特点	页码
四、专家系统与传统程序的区别	页码
五、专家系统的类型	页码
第二节专家系统的结构	页码
一、知识库	页码
二、数据库	页码
三、推理机	页码
四、解释机构	页码
五、知识获取部分	页码
第三节知识的表示	页码
一、产生式规则表示法	页码
二、一阶谓词逻辑表示法	页码
三、语义网络表示法	页码
四、框架结构表示法	页码
五、面向对象表示法	页码
第四节专家系统的开发	页码

一、建立专家系统的原则	页 6
二、专家系统的开发工具	页 6
三、专家系统的开发步骤	页 6
摇第五节摇专家系统应用实例	页 6
一、金属材料腐蚀咨询专家系统	页 6
二、材料缺陷分析专家系统	页 6
摇第六节摇专家系统的发展趋势	页 6
一、与其他计算机技术结合应用	页 6
二、展望	页 6
 第五章摇人工神经网络系统在材料科学中的应用	177
摇第一节摇概述	页 6
一、人工神经网络的特点	页 6
二、神经网络的一般框架	页 6
三、神经网络的学习方法	页 6
四、神经网络模型	页 6
五、神经网络研究的意义	页 6
摇第二节摇人工神经网络在材料科学中的应用	页 6
一、人工神经网络用于材料设计和性能预测	页 6
二、人工神经网络在材料保护方面的应用	页 6
摇第三节摇反向传播神经网络(神经网络)	页 6
一、方法原理	页 6
二、数据的预处理	页 6
三、神经网络结构	页 6
四、影响因素	页 6
五、改进的神经网络模型	页 6

摇第四节摇神经网络应用实例	图恩
一、神经网络预测碳纤维陶瓷复合材料性能	图恩
二、神经网络在软测量中的应用	图恩
摇第五节摇神经网络发展前景	图恩
一、神经网络的不足	图恩
二、神经网络发展的机遇	图恩
 第六章摇神经网络与材料科学	220
摇第一节摇神经网络的起源与发展	图恩
摇第二节摇计算机网络技术概述	图恩
一、神经网络中的资源类型	图恩
二、神经网络简介	图恩
三、神经网络协议	图恩
四、神经网络的安全	图恩
摇第三节摇网络技术在材料科学中的应用	图恩
一、材料科学信息资源的网络检索	图恩
二、网络数据库在材料科学中的应用	图恩
三、神经网络上的文献检索	图恩
 第七章摇计算机在材料科学教学中的应用	264
摇第一节摇计算机辅助教学概述	图恩
一、计算机辅助教学的基本过程	图恩
二、计算机辅助教学的类型	图恩
三、计算机辅助教学的优点	图恩
四、未来计算机辅助教学的发展趋势	图恩
摇第二节摇计算机辅助教学课件的开发	图恩

一、课件开发原则	圆源
二、课件开发步骤	圆缘
三、悦悦悦课件的开发和实现	圆怨
摇第三节摇常用软件介绍	圆猿
一、孕孕孕制作课件技巧	圆猿
二、粤粤粤制作课件技巧	圆苑
摇第四节摇课件实例	圆园
一、测试系统的总体结构	圆员
二、测试系统的开发和实现	圆圆
摇第五节摇计算机远程化教育应用	圆远
一、计算机多媒体远程教学系统	圆愿
二、材料科学中的计算机网络教学资源	猿园
三、结束语	猿圆
参考文献	303

第一章

概述

第一节 计算机技术的发展

电子计算机被公认是 20 世纪最重大的工业革命成果之一。自 20 世纪 50 年代问世以来,计算机改变了包括各个学科领域在内的世界面貌。计算机技术的发展,特别是个人计算机的普及和计算机网络技术的发展,大大提高了人们的工作效率和质量,迅速扩大了人们获取信息的能力和范围,并且开辟了许多原来可望而不可即的新领域。计算机在各行各业中越来越广泛的应用,有力地推动了国民经济、科学事业和文化事业的发展。特别是在最近 30 年的时间里,计算机的发展日新月异,在软硬件方面都取得了长足的进步,而网络技术、信息高速公路的出现,使计算机的应用已远不止科学计算,更成为科技领域存储、传输、处理、加工数字化信息的工具,渗透到国民经济、人民生活的各个领域,从而形成新时代的一种文化——计算机文化。

一、计算机软硬件技术的发展

20 世纪科学技术的飞速发展,带来了堆积如山的数据处理问题,对改进计算工具提出了迫切要求。1946 年 2 月,第一台全自动

“电子数字积分计算机”(即“电子计算机”)诞生,标志着计算机开始作为一种重要的现代工具应用于各行各业中。

计算机系统是由硬件和软件组成的。计算机硬件是指看得见、摸得着的实际物理实体,包括中央处理器、存储器和外部设备。它们是由电子的、电磁的、光学的、机械的元器件集成的芯片、组装的电路板及各种部件和装置组成。计算机软件是在计算机上运行的各种程序、要处理的各类数据以及有关文档的总称,包括系统软件和应用软件。计算机软件泛指任何类型的计算机程序,从操作系统到实用程序、应用程序、存放在只读存储器(ROM)上的程序等。计算机的硬件与软件是计算机系统中不可分割的一个整体。只有硬件而没有软件的计算机是没有任何用处的裸机;只有软件而没有硬件的支持,也只是无意义的纸上程序。计算机硬件与软件之间是相互依存、相互融合、相互促进、共同发展的关系。

计算机具备今天这样强大的功能,是计算机软、硬件迅猛发展的结果。以个人台式计算机为例进行介绍。首先是计算机的心脏——微处理器的发展。如美国英特尔公司的奔腾(Pentium)微处理器芯片在不到1厘米²的芯片上集成了1千万个晶体管,能处理32位的数据,运算速度达到每秒1亿次以上。其次是计算机的内、外部存储器容量有了几十倍的提高。再有就是输入、输出设备不断地高速化、小型化和多功能化,加上使用了先进的局部总线,极大地提高了计算机外设的运行效率。所有计算机硬件的不断改进和发展,使计算机的技术性能连上新的台阶。

计算机软件是支撑计算机应用的最重要的组成部分。仍以

个人台式计算机为例,目前已经成为人们生活中不可缺少的工具。这主要是因为各种计算机应用软件为人们处理各种实际问题带来了极大的方便和乐趣。目前,新的操作系统层出不穷,各种绘图、多媒体软件百花齐放,计算机的应用已经不是少数人专有的工具了,计算机的应用范围已不再是仅仅用于科学计算、智能化控制、工业生产控制、现代化管理、现代化通信和各种辅助工作了,它已从办公室走向了家庭,走向了更广泛的人群。

二、网络技术的发展

国际互联网是一个国际性的计算机互联网,它由数以亿计相互连接的计算机组成,范围遍及全世界,是现代社会传递信息的重要工具。它对世界的影响是巨大的,正逐步改变人们的生活、教育、娱乐、工作方式,最为重要的是它正逐步改变人们获取信息与发布信息的方式。网络信息交互的最大特点就是它打破了传统的地域差别,通过因特网将全球各地的信息“超距离”地聚集在一起,使地球成为真正意义上的“地球村”。网络也为商业活动带来了新的发展机会,特别是电子商务的不断成熟,使公司、商场都可以通过网络来发布商品信息,通过网络进行订货、销售、广告宣传等。目前,国外先进企业中,约有一半左右的生产信息是通过网络传递的,一些企业的商务活动已过渡到电子商务时代。国内网络的发展也很快,很多企业已拥有了自己的站点或主页。电子商务的概念也被国人接受并已有部分企业开始开展此种商务活动。

同时,企业内部网络(局域网)的建立使企业管理信息和工厂技术信息计算机化并通过网络管理起来,从根本上改变了企业传统的经营管理模式。企业领导层和各职能部门可以直接地、及时地通过网络和生产第一线人员交流信息,各种技术文档、资料也可通过

网络分发,甚至进行网上讨论和举办网络会议,从而大大提高了工作效率,减少了企业在经营、管理、设计、生产各环节的脱节现象。为了形成完整的网络信息系统,现已开发出不少成套的软件系统。从管理信息的角度提出的物料需求计划系统 MRP (Material Requirements Planning, 物料需求计划),主要是管理企业的原料、半成品到成品的物流信息。随后又发展为制造资源计划 MRP II (Manufacturing Resource Planning, 制造资源计划)。这一系统可以将企业中的产、供、销、人、财、物,即各种资料的信息统一管理起来。在此基础上,又发展为企业资源计划 ERP (Enterprise Resource Planning, 企业资源计划),它扩展了 MRP II 的信息范围。从企业外部来说,包括了供应商、营销网络和客户的信息;从企业内部来说,包括了从设计到生产制造的信息,从而形成一个完整的信息系统。可以说,未来的工厂管理就是建立在计算机网络基础上的数字化工厂管理。

第二节 材料科学技术的发展

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。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 50 年代,人们把材料、能源与信息称为当代文明的三大支柱,50 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。

一、材料科学的发展

材料的分类方法很多,根据其组成和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可分为结构材料 and 功能材料;根据用途还可以分为建筑材料、能源材料、医用材料等。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学科。就材料研究整体而言,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”。

材料科学与工程是主要研究材料组成、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。研究的主要内容包括材料的组织、结构、杂质、性能之间的关系,材料的合成与制备方法、材料性能测试和工程应用,材料在加工、使用过程中的变化和失效等。

近几十年来,材料科学与工程取得了极大的进展。从金属材料到非金属材料都取得了长足的进步。特别是高分子材料、复合材料、无机非金属材料的发展,使得材料科学已成为当今社会支柱技术之一。

二、未来材料科学发展趋势

材料科学是多学科交叉的新兴学科,它与许多基础学科有着密不可分的联系,如物理学、电子学、声学、光学、固体化学、量子化学、数学、计算机科学等。

近代材料科学正在发生深刻的变化,其突出特征主要表现在以

下三个方面。

(员)科学技术化、技术科学化,科学与工程技术日益融合,相互促进。

(圆)新材料、新技术、新工艺相互结合,为各个工程领域开拓了新的研究内容,带来了新的生命力和发展前景。

(猿)学科之间的相互交叉渗透,使得各学科之间的关系日益密切,互相促进,难以分割。基础科学(如数学、物理、化学、生物等)和现代技术(如微电子、计算机等)的新成果也往往和材料科学的发展交织在一起。

材料科学的研究,目前很大程度上还依赖于事实和经验的积累,系统的材料研究还有很长的路要走。材料科学与现有先进技术结合已初露端倪,未来材料科学的发展必然是多个学科的共同发展,特别是计算机科学在材料科学中的应用研究,是未来材料科学发展的必然趋势。

新材料、新合金的设计和开发,长期以来采用的是配方方法,一般需经对成分—组织—性能关系的调整做多次反复实验,才能获得较满意的结果。这种方法有相当大的盲目性,费工、费时、经济损耗大,为此人们期望从实验比较、总结归纳的研制方法走向演绎计算的方法,而计算机技术的飞速发展恰恰迎合了这一发展趋势,即按所需材料性能来设计、制备新材料、新合金,并使所设计的合金成分、组织(或工艺)达到最佳配合。

这种设计的基本原理是,从已有的大量数据、经验事实出发,利用现有的各种不同结构层次的数据模型,如合金的成分、组织、结构与性能关系的数学模型及相关数据理论,如固体与分子经验电子理论、量子理论等,通过计算机运算对比、推理思维来完成优选新合金的设计过程。这其中引入了数学上的最优化理论来获得最佳方案

的材料配方及生产工艺。

现在,某些新型材料的分子设计方案,如液晶化合物、碳原子簇物质、特种塑料、橡胶制品的分子设计与合成,已经成功地借助计算机进行结构优化和设计。随着材料科学技术和计算机技术的进一步发展,材料的研制可能不再经过中间实验阶段,而是从实验室直接过渡到工厂生产。新材料的合成,只要经过化学计算,重新组合分子就可以了。

第三节 学科交叉点——计算材料学概述

计算材料学是20世纪60年代发展形成起来的一门新兴边缘学科。它运用固体物理理论、理论化学和计算机算法来研究材料学中一些实验研究有困难的课题。该学科在世界范围内还没有一个统一的术语,在美国被称为“计算材料学”,欧洲则称为“计算材料学”,日本称为“计算材料学”,国内则一般沿用欧洲的习惯,称之为计算材料学。虽然各个国家的称呼不同,但是学科研究的基本含义及内容是一致的,简而言之,计算材料学是材料研究中的“计算机实验”。

计算材料学的设想始于20世纪60年代,当时计算材料学研究的主要目的就是利用计算机算法来进行材料设计。在60年代初期,苏联便开展了关于合金设计以及无机化合物的计算机预报等早期工作。那时苏联卫星上天,说明其使用的材料是先进的。苏联人于1960年便在理论上提出人工半导体超晶格概念,不过当时他们没有提出如何在技术上加以实现的建议。后来到1972年,江崎(江崎)和裁(朱兆祥)才正式从理论和实践结合上提出了通过改变组分或掺杂来获得人工超晶格。80年代中期日本材料界提出了