

# 《计算材料科学数理模型及计算机模拟》

## 图书基本信息

书名：《计算材料科学数理模型及计算机模拟》

13位ISBN编号：9787030367952

10位ISBN编号：7030367952

出版时间：2013-3

出版社：科学出版社

页数：341

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)

# 《计算材料科学数理模型及计算机模拟》

## 内容概要

《计算材料科学数理模型及计算机模拟》主要以凝固和形变再结晶过程中的微观组织演变为主线，介绍了从宏观至介观尺度的多尺度模拟方法及基本理论，同时对微观至宏观尺度的主要模拟方法，如第一性原理、分子动力学、元胞自动机，以及准连续介质多尺度模拟方法等，进行了较详细的介绍。主要内容如下：计算材料科学数理模型的建模基础内容及方法，常用的数值分析方法，合金凝固过程的多尺度模拟方法及理论，形变再结晶过程的多尺度模拟，分子动力学模拟方法，准连续介质的多尺度模拟方法及基本理论，密度泛函理论和基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，以及常用的数据处理方法。

《计算材料科学数理模型及计算机模拟》可用作材料科学与工程学科的研究生和高年级本科生相关课程的教材或参考书，也可供从事材料科学研究的教师和研究人員参考。

## 书籍目录

前言 绪论 第1章计算材料科学数学建模 1.1建模基础 1.1.1模型及其作用 1.1.2模型的分类 1.1.3建模步骤和原则 1.1.4常用的建模方法 1.2建模实例 1.2.1位错运动速率模型 1.2.2位错组态演化模型 参考文献 第2章常用的数值分析方法 2.1有限差分方法 2.1.1差分方程的建立 2.1.2差分方程的求解方法 2.1.3误差分析 2.2控制容积方法 2.2.1控制方程的守恒性 2.2.2控制容积法的空间区域离散 2.2.3控制容积法 2.3元胞自动机方法 2.3.1基本原理 2.3.2邻居类型 2.3.3计算方法 2.4 C语言编程基础 2.4.1基本语句 2.4.2指针及其应用 2.4.3结构应用 2.4.4编程实例 参考文献 第3章合金凝固过程多尺度模拟 3.1多尺度模拟及合金热力学基础理论 3.1.1多尺度模拟概述 3.1.2合金热力学理论 3.1.3二元合金形成焓模型 3.1.4三元合金形成焓模型 3.2合金凝固温度场数理模型及模拟 3.2.1合金凝固温度场数理模型 3.2.2半连续铸造温度场数值模拟 3.3凝固组织演变模拟理论与方法 3.3.1液固相变的元胞自动机模型 3.3.2微观组织演变数理模型 3.4半固态铝合金凝固组织模拟及工艺优化 3.4.1微观组织评估的量化模型 3.4.2铝合金凝固组织的多尺度模拟与实验比较 3.4.3基于多尺度模拟的半固态合金设计及工艺优化 参考文献 第4章形变再结晶过程多尺度模拟 4.1再结晶概论 4.1.1影响再结晶的主要因素 4.1.2再结晶基本理论 4.2塑性变形力学基础 4.2.1基础变量及其表示方法 4.2.2静力平衡方程和几何方程 4.2.3塑性本构方程 4.3再结晶组织演变模型 4.3.1形核模型 4.3.2晶核长大模型 4.3.3晶粒长大模型 4.3.4元胞自动机模型 4.4形变再结晶过程多尺度模拟实例 4.4.1塑性变形数值模拟 4.4.2再结晶组织演变数值模拟 参考文献 第5章分子动力学模拟方法 5.1微观至纳观尺度模拟基本原理 5.1.1波函数与薛定谔方程 5.1.2玻恩-奥本海默近似 5.2分子动力学方法简介 5.2.1分子动力学基本思想 5.2.2分子动力学计算流程 5.3分子动力学基本理论 5.3.1分子动力学系综 5.3.2原子势函数 5.3.3边界条件、初始条件 5.3.4数值求解方法 5.4分子动力学模拟实例 参考文献 第6章准连续介质多尺度模拟方法 6.1准连续介质方法的基本原理 6.1.1系统计算总体构架 6.1.2有限变形的连续体构形 6.1.3复杂Bravais晶格的原子级本构关系 6.1.4局域 / 非局域交界面的耦合 6.1.5有限温度效应模型 6.1.6网格的自适应 6.2材料表面微纳级精度加工的QC方法模拟 6.2.1单晶铜微纳加工过程模拟 6.2.2单晶硅微纳加工过程模拟 6.2.3硅 / 铜复合材料微纳加工分析 参考文献 第7章第一性原理计算方法 7.1概述 7.2密度泛函理论 7.2.1近似方法 7.2.2 Hohenberg - Kohn定理 7.2.3 Kohn - Sham方程 7.2.4交换 - 关联泛函 7.2.5自洽计算 7.3基于密度泛函理论的第一性原理计算方法 7.3.1原子轨道线性组合法 7.3.2正交化平面波方法 7.3.3赝势方法 7.3.4线性缀加平面波方法 7.4电子结构的第一性原理计算 7.4.1电子结构 7.4.2计算机软件介绍 7.4.3电子结构计算结果分析的经验方法 7.5第一性原理计算实例 参考文献 第8章常用的数据处理方法 8.1数据拟合方法及其计算分析 8.1.1基本原理 8.1.2参考程序代码 8.1.3数据拟合程序应用 8.2用Excel分析软件进行数据拟合 8.3用Origin分析软件进行数据分析 8.3.1理论建模初步 8.3.2实验数据的拟合分析 8.4二维平面图形的画法 8.4.1用Origin软件画温度场 8.4.2用Matlab软件画温度场 参考文献

版权页：插图：3.2合金凝固温度场数理模型及模拟 传热过程数值模拟是材料科学与工程领域的一个基本问题，许多处理过程都与温度场密切相关，如金属熔体的凝固、材料的加工成形、材料的烧结及热处理等。传热过程对材料的制备与成形、组织性能预报与控制、材料设计及工艺优化、绿色节能及新技术开发和应用等都是极其重要的。因此，利用数值分析与计算技术解决传热问题是材料科学与工程领域中具有重要作用。熔体凝固过程的温度场数值模拟开始于20世纪60年代。丹麦的Forsund把有限差分法用于铸造凝固过程的传热计算，开辟了数值计算方法进行凝固理论研究的新途径。1965年，美国通用汽车公司的Henzel和Keverian用瞬态传热模型对大型铸钢件进行了温度场数值模拟。这些研究工作使人们意识到数值模拟技术在铸件凝固过程研究方面的巨大潜力。之后，世界上许多工业发达的国家都相继开展了这方面的研究工作。1970年，Michigan大学的Marrone等人以及日本的大中逸雄等相继开始了凝固过程模拟，法国、挪威、加拿大等国家的研究人员也对凝固过程温度场的数值模拟方法、潜热处理、对流换热、边界条件、补缩距离及毛细补缩等问题进行了一定程度的研究，为数值模拟走向实用化起了巨大的推动作用。我国也有一大批学者在这方面的研究取得了很大进展，进入20世纪80年代后，模拟技术发展更快，在基本传热数学模型及潜热、界面气隙等问题的处理等方面取得不少成果。第2章以一个简单例子说明了温度场的数值计算方法，而实际中遇到的温度场一般较为复杂，尤其是对于金属凝固过程而言还包含相变潜热，这还可引起边界上传热条件的变化，下面以半连续铸造过程中为例，说明合金凝固温度场模拟及潜热和边界条件处理模型和模拟方法。

### 3.2.1合金凝固温度场数理模型

#### 3.2.1.1热传递的基本方式

热传递有三种基本方式，即传导（导热）、对流和辐射。在这三种基本方式中热量传递的物理本质是不同的。实际中的传热及边界问题无非是这三种基本形式的具体体现。对于研究的区域内部，传导往往是主要传热方式，而在边界上，对流和辐射往往是主要形式。

# 《计算材料科学数理模型及计算机模拟》

## 编辑推荐

《计算材料科学数理模型及计算机模拟》可用作材料科学与工程学科的研究生和高年级本科生相关课程的教材或参考书，也可供从事材料科学研究的教师和研究人員参考。

# 《计算材料科学数理模型及计算机模拟》

## 版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:[www.tushu000.com](http://www.tushu000.com)