

<<计算材料学>>

图书基本信息

书名：<<计算材料学>>

13位ISBN编号：9787122137845

10位ISBN编号：7122137848

出版时间：2012-7

出版时间：坚增运、刘翠霞、吕志刚 化学工业出版社 (2012-07出版)

作者：坚增运 等著

页数：140

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：<http://www.tushu007.com>

<<计算材料学>>

内容概要

计算材料学以计算机技术为工具和手段,运用数值预测方法解决材料学中遇到的复杂问题。

《高等学校“十二五”规划教材:计算材料学》介绍计算材料学的内容,主要包括:材料研究中数学模型的基本概念以及建立数学模型的基本步骤、原则和方法;常用于数值分析的有限差分方法和有限元方法;计算机模拟过程中涉及的系综;适用于随机事件的蒙特卡罗方法;分子动力学方法;势函数理论及模型;固体的扩散相变模型即相场动力学模型;能够处理复杂系统在离散空间?时间上演化规律的元胞自动机方法。

还附有各种模拟方法在材料科学中的典型应用和代表性的例子。

《高等学校“十二五”规划教材:计算材料学》可作为材料科学与工程学科研究生和高年级本科学生的教材,也可供相关领域科技工作者参考。

章节摘录

版权页：插图：第1章 材料科学中的数学模型 科学研究根本目的在于认识世界、改造世界。然而，现实世界的绝大部分规律既不那么显而易见也不那么简单，以至于如果人们不借助抽象概念就难以把握世界的本质规律。

科学抽象意味着借助模型研究现实世界某一方面的规律，通过设计和建立模型将真实情况简单化处理，建立一个反映真实情况本质特性的模型，并进行公式化描述。

换句话说，模型就是用非常相似而简单的结构描述所研究的现实系统，所以，抽象化建立模型可以认为是提出理论的开始。

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。

材料科学作为21世纪的重要基础科学之一，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。

本章主要介绍数学模型的基本概念，建立数学模型的基本原则、步骤和方法，同时给出一些与材料科学有关的建模实例。

1.1 数学模型 1.1.1 数学模型的概念 关于模型，尽管已有很多论文和专著，但只有很少几位作者涉及模型的基本概念和本质特征。

例如Rosenblueth和Wiener于1945年在其著述中对这一方面做出了引人注目的贡献；1986年，Koonin对模型的哲学问题进行了讨论；1995年，Bellomo和Preziosi对模型概念给出了一个简明的数学定义。

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。

人们所接触到的数学模型，在物理学中最典型的莫过于力学中的牛顿三定律。

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、马克思描述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？

通常把客观存在的事物及其运动形态统称为实体，模型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。

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。

<<计算材料学>>

编辑推荐

《高等学校"十二五"规划教材:计算材料学》主要讲述了计算材料学以计算机技术为工具和手段与运用数值预测方法解决材料学中遇到的复杂问题。

《高等学校"十二五"规划教材:计算材料学》可作为材料科学与工程学科研究生和高年级本科学生的教材,也可供相关领域科技工作者参考。

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:<http://www.tushu007.com>