

<<计算材料学>>

图书基本信息

书名：<<计算材料学>>

13位ISBN编号：9787502539085

10位ISBN编号：7502539085

出版时间：2002-1

出版时间：化学工业出版社

作者：项金钟 吴兴惠 译

页数：460

字数：400000

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>

## &lt;&lt;计算材料学&gt;&gt;

## 内容概要

本书是根据德国Wiley-VCH图书公司出版的D·Raabe所著《计算材料学》(Computational Materials Science)译出的。

作者在书中采用系统而独特的观点,论述了计算材料科学中广泛使用的各种不同的模拟方法。

本书共由五部分组成:第一部分为基础篇,主要介绍了在材料模型化和模拟中所采用的基本概念和原理;第二部分论述了纳观至介观尺度的模拟方法,包括各种Metropolis蒙特卡罗和分子动力学方法;第三部分是关于微观至介观层次的模拟方法,其中包括位错动力学、金兹堡—朗道型扩散相场动力学方法、其中包括位错动力学、金兹堡—朗道型扩散相场动力学方法、元胞自动机、多态波茨动力学模型、几何及组分模型、拓扑网格及顶点模型;第四部分在介观至宏观晶体模型;第五部分主要阐述了模型化学模拟的集成化问题。

在本书附录中,作者还对计算机分类、模糊集合论、人工神经网络和逾渗理论作了简要介绍。

同时,每章还给出了各种模拟方法在材料科学中的应用例子,并附有大量参考文献,以便为读者进一步学习和研究提供帮助。

本书是计算机科学方面的一本较系统、完整的参考书,可供综合大学和理工科大学材料科学与工程各专业高年级学生、研究生、教师以及相关专业的科学研究工作者参考。

## &lt;&lt;计算材料学&gt;&gt;

## 书籍目录

常用缩写词 计算材料学中的常用缩写词 计算机科学中的常用缩写词 常用符号材料常数 (A) 材料常数 (B) 第一部分 基础篇 第一章 概论 第二章 材料科学中的模型化与模拟 2.1 几个概念 2.2 模型化的基本思想 2.3 广义态变量 2.3.1 大于原子尺度的模型化概念 2.3.2 自变量 2.3.3 态变量和因变量 2.3.4 运动学方程 2.3.5 状态方程 2.3.6 结构演化方程 2.3.7 各种参数 2.3.8 唯象模型化举例 2.3.9 解析模型与数值模型 2.4 数值模型化与模拟 2.5 模型的基本范畴 2.5.1 空间尺度 2.5.2 空间维度(数) 2.5.3 空间离散化 2.5.4 预测性特征 2.5.5 描述性特征 2.5.6 路径相关性 2.6 系列(Round?Robin)检验法 第三章 微分方程原理及其解法 3.1 微分方程导论 3.2 偏微分方程的解法 3.3 有限差分(FD)方法的基本原理 3.3.1 时间离散化 3.3.2 有限差分方法的数值误差 3.3.3 欧拉(Euler)方法 3.3.4 跳步(Leap?Frog)法 3.3.5 预测?校正法 3.3.6 科兰克?尼科尔森(Crank?Nicholson)法 3.3.7 龙格-库塔(Runge?Kutta)法 3.4 有限(FE)法的基本原理 3.4.1 离散化和有限元法的基本步骤 3.4.2 里茨(Ritz)变分法 第二部分 纳观至微观尺度的模拟方法 第四章 基本原理 第五章 原子尺度模拟的统计力学 第六章 蒙特卡罗(Monte Carlo)积分与模拟 6.1 引言和原理 6.2 几点历史注释 6.3 随机数 6.4 无规行走模拟 6.5 随机抽样积分 ..... 第七章 分子动力学 第三部分 微观至介观尺度的模拟方法 第八章 导论 第九章 离散位错静力学和动力学 第十章 金兹堡?朗道(Ginzburg?Landau)相场动力学模型 第十一章 元胞自动机(CA)方法 第十二章 介观尺度动力学蒙特卡罗和波茨模型 第十三章 几何及组分(元)模型 第十四章 拓扑网格和顶点模型 第四部分 介观至宏观尺度的模拟方法 第十五章 导论 第十六章 介观至宏观尺度上的有限元(FE)及有限差分(FD)法 第十七章 多晶体弹性及塑性模型 第五部分 模型化与模拟的集成化 第十八章 基本原理 第十九章 微结构模拟中的空间和时间标度 附录 附录A 阅读材料 附录B 计算机的分类 附录C 高级经验性方法 附录D 逾渗理论 参考文献

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>