



УДК 62.506.2+539.2:546.821.261

Кутюлин С. А., Котиков В. И., Писиченко Г. М.
Кибернетические модели в материаловедении /
Под ред. члена-корр. РАС С. А. Кутюлина. — Но-
восибирск: Изд-во ChemLab.NCD, 1996. — 232 с.
ISBN-7615-0149-X

В монографии обобщены и представлены новые теоретические и экспериментальные результаты исследований тугоплавких соединений методом компьютерного моделирования их основных физико-химических свойств в области существования. Изложен единый модельно-статистический подход, основанный на расчете характеристик распределения энергии валентных электронов и на статистическом анализе уже изученных свойств различных соединений. Это позволяет строить модели в виде функций от электронного строения компонентов соединений и их состава для их для прогнозирования областей существования, еще не изученных соединений, их свойств, механизма и направления реакции, для анализа диффузии, перекристаллизации, областей гомогенности, расслаивания, для описания кинетических процессов, предсказания основных физико-химических свойств и решения других прикладных задач.

Описан проблемно-ориентированный пакет, пакет прикладных программ для ЕС ЭВМ, реализующий рассмотренный подход; даны методы его применения на примере программной среды USMO.

Книга предназначена для научных и инженерно-технических работников, занимающихся вопросами материаловедения, исследования и синтеза тугоплавких соединений, материалов и сплавов. Табл. 67. Ил. 33. Библиогр.: 115 назв.

РЕЦЕНЗЕНТЫ

доктор физико-математических наук Ю. М. Гравес
доктор технических наук Г. С. Звон
кандидат технических наук В. К. Клепачев
кандидат химических наук С. И. Рыбов

Рекомендовано к печати кафедрами вычислительной техники и математических методов химии и материаловедения Новосибирского института инженеров железнодорожного транспорта

К 2094070000 30-96
185(012)-91

ISBN 5-7615-0149-X

© Кутюлин С. А., Котиков В. И., Писиченко Г. М., 1996

Оглавление

Предисловие	5
Глава 1. Основы моделирования в материаловедении	9
1.1. Задачи прогнозирования свойств соединений и построения кибернетических моделей	9
1.2. Принципы модельно-статистического подхода и его возможности	23
Глава 2. Электронное строение и свойства соединений	32
2.1. Физический анализ физико-химических свойств вещества	32
2.2. Валентная связь в соединениях	40
2.3. Упрощенные квантово-механические модели электронного строения соединений	54
2.4. Карты распределения электронных полос (КРЕП), способы их построения	59
Глава 3. Методы многофакторного статистического моделирования	70
3.1. Основные вероятностно-статистические понятия и предосторожности	70
3.2. Основные задачи многофакторной прикладной статистики	80
3.3. Регрессионный анализ	84
3.4. Канонический анализ (распознавание образов)	86
3.5. Кластерный анализ (таксономия)	91
3.6. Канонические многофакторные модели	95
3.7. Канонические модели	97
3.8. Методы динамики	105
3.9. Оценка качества моделей и выбор информативных признаков	107
Глава 4. Прогноз качественных состояний неорганических процессов	113
4.1. Системы тринных соединений	113
4.2. Кристаллическая структура и разупорядочение	118
4.3. Периодические реакции синтеза и механизм твердофазных процессов	129
4.4. Кинетика реакции кристаллизации, области гомогенности, расслаивания	131
4.5. Каталитическая активность, разложение перекиси водорода	135
Глава 5. Моделирование физико-химических свойств соединений и материалов	139
5.1. Прогноз свойств элементов и двойных соединений	139
5.2. Физико-химические модели прогнозирования физико-химических свойств и свойств калькогенидов R3E	148
5.3. Прогноз свойств и типа дефектообразования	155
5.4. Прогноз расслаивания и расплавления	160
5.5. Кинетика окисления. Физико-химическое и компьютерное моделирование	161
5.6. Системное описание, прогноз и расчет свойств материалов при	