

材料科学与工程系列教材 研究生用书

材料科学中数值模拟与计算

Numerical Simulating and Calculating in Materials Science

徐瑞 编著

哈尔滨工业大学出版社

TB3

104

2005

材料科学与工程系列教材 研究生用书
材料科学中数值模拟与计算

Numerical Simulating and Calculating in Materials Science

徐 瑞 编著

哈尔滨工业大学出版社

哈 尔 滨

内 容 简 介

本书主要介绍材料科学中的数值模拟与计算问题,共分十章:前三章介绍数值模拟与计算所必需的数学基础,包括线性方程组的求解方法,数值计算的有限差分法和有限元法;第四章到第七章介绍材料科学中的数值模拟,包括铸造过程、热处理过程和焊接过程中的温度场、应力场和浓度场等问题;第八章和第九章介绍了相图计算的基本原理以及相关计算软件;第十章介绍了量子力学计算与相关软件 Materials Studio 的应用。

本书可作为材料学科研究生的参考书,也可用做相关专业研究生以及有关科研人员 and 工程技术人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料科学中数值模拟与计算/徐瑞编著. —哈尔滨:
哈尔滨工业大学出版社, 2005.4

ISBN 7-5603-2139-9

I. 材… II. 徐… III. 材料科学-数值模拟

IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 021103 号

出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006
传 真 0451-86414749 电话:86416203
印 刷 黑龙江省地质测绘印制中心印刷厂
开 本 787×960 1/16 印张 16.625 字数 315 千字
版 次 2005 年 4 月第 1 版 2005 年 4 月第 1 次印刷
书 号 ISBN 7-5603-2139-9/TB·55
印 数 1~3 000
定 价 24.00 元

前 言

科学技术的发展不仅对材料的性能提出了更高要求,而且要求材料制备过程周期短、精度高、成本低。传统的材料研究与制备方法已经不适合现代科技的发展,因此材料科学中的数值模拟与计算也就成了材料科学中不可或缺的一种先进研究手段。

计算机作为一种现代工具在材料科学研究与工程中的应用越来越广泛,极大地促进了材料科学研究的深入发展,也为材料科学中的数值模拟与计算提供了必要的手段。随着计算机技术的发展,近些年来数值预测方法在材料科学与工程领域取得了巨大进步。同时包括从头算起(ab initio)的量子力学计算、分子动力学和蒙特卡罗方法的跨学科的计算材料学也应运而生,使材料科学走到了一个新的快速发展阶段。

由于材料科学中的数值模拟与计算包含了多个学科的诸多方面内容,限于篇幅,本书不可能包含所有内容。考虑到大多数材料科学工作者所具有的数学和物理方面的基础,本着注重基础和与实际应用相结合的原则,本书的前三章首先介绍了进行数值模拟与计算所必需的数学基础,包括线性方程组的数值求解方法、物理方程的常用数值解法——有限差分法和有限单元法;从第四章起介绍材料科学中的数值模拟问题。在材料制备与加工中经常遇到凝固、热处理和焊接问题,这些问题中均涉及到温度场、应力场和浓度场以及组织变化。为了节省篇幅,减少不必要的重复,同时考虑凝固过程、热处理过程和焊接过程的特点,并结合各种过程中的模拟研究现状,将温度场、应力场、浓度场和组织变化的模拟分配到四章当中,分别是凝固过程与组织的数值模拟、热处理过程数值模拟、浓度场的数值模拟和焊接过程数值模拟。其中第四章主要介绍温度场的模拟和液固相变过程的组织模拟;第五章主要介绍固态相变过程组织模拟和应力场模拟;第六章主要介绍浓度场模拟;第七章主要介绍焊接的热过程特点和使用不同方法进行的温度场模拟。在每章中给出了最新研究成果的例子。

相图计算在材料研究和新材料开发中起着越来越重要的作用,许多国家先后开发了不同的相图计算软件。考虑到这一点,本书用两章的篇幅来介绍相图计算的基本原理和比较成功的几种软件。

第十章主要介绍一些量子力学基础和目前国际上最为流行的著名材料设计与计算软件 Materials Studio。

本书的编著出版得到了燕山大学课程建设项目的支持,谨此致谢。

由于作者的水平所限,书中疏漏、不当之处在所难免,恳请读者指正。

编者

2005年元月

材料科学与工程系列教材研究生用书

编审委员会

| | | | |
|--------|-----|--------|-----|
| 顾 问 | 肖纪美 | 徐滨士 | |
| | 杜善义 | 吴 林 | |
| 主任委员 | 曹茂盛 | 赫晓东 | 成国祥 |
| 委 员 | 徐惠彬 | 田永君 | 韩杰才 |
| | 毛大立 | 翟玉春 | 蒋成禹 |
| | 王富趾 | 刘世参 | 刘常升 |
| | 戴起勋 | 李木森 | 潘庆谊 |
| | 臧竞存 | 徐甲强 | 雷明凯 |

目 录

| | |
|------------------------------|------|
| 第 1 章 常用计算方法 | (1) |
| 1.1 迭代法求解线性方程组 | (1) |
| 1.2 追赶法求解三对角线方程组 | (5) |
| 1.3 三次样条插值函数 | (6) |
| 第 2 章 有限差分法 | (12) |
| 2.1 差分的含义与误差 | (12) |
| 2.2 差分格式 | (14) |
| 2.3 不同差分格式的比较 | (20) |
| 2.4 二维系统的差分 | (23) |
| 2.5 二维交替方向差分 | (26) |
| 第 3 章 有限单元法 | (35) |
| 3.1 有限单元法求解问题的思路与步骤 | (35) |
| 3.2 网格剖分 | (36) |
| 3.3 温度场的泛函 | (38) |
| 3.4 插值函数 | (42) |
| 3.5 单元分析 | (45) |
| 3.6 总体合成 | (51) |
| 第 4 章 凝固过程与组织的数值模拟 | (56) |
| 4.1 凝固过程温度场的模拟 | (56) |
| 4.1.1 凝固过程温度场的数学模型 | (57) |
| 4.1.2 求解条件 | (57) |
| 4.1.3 热物性的处理 | (60) |
| 4.1.4 潜热的处理 | (63) |
| 4.1.5 界面的处理 | (68) |
| 4.1.6 考虑界面的处理方法 | (70) |
| 4.2 凝固组织的模拟 | (71) |
| 4.2.1 微观组织数值模拟的物理与数学基础 | (72) |
| 4.2.2 微观组织数值模拟的方法 | (85) |

| | |
|------------------------|-------|
| 第 5 章 热处理过程的数值模拟 | (99) |
| 5.1 热处理过程数值模拟的特点 | (99) |
| 5.2 热处理过程温度、组织转变和应力的关系 | (100) |
| 5.3 组织转变的数值模拟 | (101) |
| 5.3.1 组织转变模型 | (102) |
| 5.3.2 按连续冷却转变曲线模拟 | (103) |
| 5.3.3 按等温转变曲线模拟 | (105) |
| 5.4 热处理过程应力场模拟 | (108) |
| 5.4.1 弹性轴对称问题的基本控制方程 | (108) |
| 5.4.2 空间离散化 | (109) |
| 5.4.3 弹性问题的泛函及变分 | (111) |
| 5.4.4 热弹性问题 | (114) |
| 5.4.5 热弹塑性问题 | (115) |
| 5.4.6 约束条件 | (126) |
| 5.5 热处理过程模拟存在的问题与展望 | (127) |
| 第 6 章 浓度场的数值模拟 | (129) |
| 6.1 浓度场与温度场、应力场的关系 | (129) |
| 6.2 浓度场的控制方程 | (130) |
| 6.3 初始条件、边界条件与移动边界的处理 | (133) |
| 6.4 扩散系数 | (136) |
| 6.5 气体渗碳过程数值模拟 | (138) |
| 6.5.1 气体渗碳过程模拟的数学模型 | (138) |
| 6.5.2 矩形截面有限差分法离散过程 | (139) |
| 6.5.3 尖角有限元法离散过程 | (140) |
| 6.5.4 模拟过程与模拟结果 | (141) |
| 6.6 高合金钢固体渗碳的模拟 | (142) |
| 6.6.1 高合金钢固体渗碳过程 | (142) |
| 6.6.2 渗碳的数学模型 | (143) |
| 6.6.3 模拟参数的确定 | (144) |
| 6.6.4 模拟结果与试验的对比 | (145) |
| 6.7 钢件渗碳过程计算机模拟发展与展望 | (146) |
| 第 7 章 焊接过程的数值模拟 | (147) |
| 7.1 概述 | (147) |

| | |
|--|--------------|
| 7.2 焊接过程特点与焊接热效率 | (151) |
| 7.2.1 焊接热过程的特点 | (151) |
| 7.2.2 焊接热源和焊接热效率 | (152) |
| 7.3 有限差分法焊接热传导过程模拟 | (155) |
| 7.3.1 一维焊接热传导的差分计算 | (155) |
| 7.3.2 二维焊接热传导的差分计算 | (156) |
| 7.4 有限单元法焊接热传导过程模拟 | (157) |
| 7.4.1 空间离散 | (158) |
| 7.4.2 时间离散 | (159) |
| 7.4.3 二维不稳定热传导的单元算式 | (162) |
| 7.5 摩擦焊接过程数值模拟 | (164) |
| 7.5.1 摩擦焊接界面的热输入模型 | (165) |
| 7.5.2 摩擦焊接头焊合区金属塑性变形的模型 | (167) |
| 7.5.3 摩擦焊接过程参量场的热力耦合分析 | (169) |
| 第8章 相图计算原理 | (172) |
| 8.1 相图计算的基本原理 | (173) |
| 8.1.1 相图计算的基本依据 | (173) |
| 8.1.2 温度表达式 | (175) |
| 8.1.3 自由能与化学位函数的表达式 | (175) |
| 8.1.4 规则溶剂模型的过剩自由能 | (176) |
| 8.1.5 亚规则溶液模型的过剩自由能 | (176) |
| 8.1.6 过剩自由能的多项式表达 | (177) |
| 8.2 相图计算方法 | (177) |
| 8.2.1 以体系自由能最小判据求平衡相成分 | (177) |
| 8.2.2 以平衡相的化学势相等判据求平衡相成分 | (178) |
| 8.3 二元相图的扩展 | (182) |
| 8.3.1 对称方法 | (182) |
| 8.3.2 非对称方法 | (184) |
| 8.4 相图合成 | (186) |
| 第9章 相图计算软件及其应用 | (187) |
| 9.1 稳定相图计算的重要性 | (187) |
| 9.2 材料科学的计算工具 THERMO - CALC 与 DICTRA | (189) |
| 9.2.1 传统的 Thermo - Calc 模块化 | (190) |
| 9.2.2 视窗 Thermo - Calc | (196) |

| | | |
|--------|------------------------------------|-------|
| 9.2.3 | DICTRA | (197) |
| 9.2.4 | Thermo - Calc 编程界面 | (206) |
| 9.3 | 其他有关相图计算的软件 | (206) |
| 9.3.1 | 来自美国的相图计算软件 PANDAT | (206) |
| 9.3.2 | 英国国家物理实验室的热力学与相平衡软件 MTDATA | (212) |
| 9.3.3 | 加拿大热力学软件与数据库 FactSage | (217) |
| 9.3.4 | 法国科学家 ThermoSuite | (219) |
| 9.3.5 | 视窗 MALT 热力学数据库 | (222) |
| 第 10 章 | 量子力学计算与 Materials Studio 的应用 | (229) |
| 10.1 | 量子力学基础与第一性原理 | (229) |
| 10.1.1 | 波函数 | (229) |
| 10.1.2 | 薛定谔方程 | (230) |
| 10.1.3 | 第一性原理 | (233) |
| 10.2 | Materials Studio 简介 | (234) |
| 10.3 | Materials Studio 中的 CASTEP | (236) |
| 10.3.1 | CASTEP 的任务 | (236) |
| 10.3.2 | 如何创立 CASTEP 计算 | (240) |
| 10.3.3 | CASTEP 计算结果分析 | (241) |
| 10.4 | Materials Studio 中的 Reflex | (241) |
| 10.4.1 | Reflex 主要工具 | (242) |
| 10.4.2 | Reflex 特点与功能 | (243) |
| 10.4.3 | Reflex 的任务 | (243) |
| 10.5 | Materials Studio 中的 Discover | (246) |
| 10.5.1 | Discover 计算的步骤 | (247) |
| 10.5.2 | Discover 中的力场 | (247) |
| 10.5.3 | Discover 中的设置 | (248) |
| 10.5.4 | Discover 中的最小化 | (248) |
| 10.5.5 | Discover 中的动力学模拟 | (250) |
| 10.5.6 | Discover 中的分析 | (253) |
| 参考文献 | | (255) |

第 1 章 常用计算方法

在材料科学与工程中进行有关温度场、扩散、应力以及相图等问题的计算时，需要用有限差分方法、有限单元方法等求解偏微分方程，最终归结到线性方程组的求解问题。在实验数据的处理中，常遇到实验数据拟合和插值问题，本章介绍有关的一些基本方法。

1.1 迭代法求解线性方程组

一、雅克比(Jacobi)迭代法

设有 n 阶方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (1.1)$$

若系数矩阵为非奇异阵，且 $a_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$ ，将方程组(1.1)改写为

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - 0 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \cdots - a_{1n}x_n) \\ x_2 = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - 0 - a_{23}x_3 - \cdots - a_{2n}x_n) \\ \vdots \\ x_n = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1} - 0) \end{cases}$$

然后写成迭代格式

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1}^{(k)}) \end{cases} \quad (1.2)$$

式(1.2)也可以简单地写为

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 1, 2, \dots \quad (1.3)$$

对式(1.2)或(1.3)给定一组初始值 $X^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T$ 后,经反复迭代得到一向量序列 $X^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T$,如果 $X^{(k)}$ 收敛于 $X^{(*)} = (x_1^{(*)}, x_2^{(*)}, \dots, x_n^{(*)})^T$,则 $x_i^{(*)}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) 就是方程组(1.1)的解。这一方法称为雅可比(Jacobi)迭代法或简单迭代法,式(1.2)或(1.3)称为雅可比迭代格式。

为讨论迭代法的收敛性,常常要用到迭代公式(或格式)的矩阵形式,为此将(1.1)式表示为矩阵形式

$$Ax = b \quad (1.4)$$

其中, $A = [a_{ij}]$ 为 $n \times n$ 阶非奇异的方阵, $b = \{b_i\}^T$ 为 n 阶列向量。将系数矩阵 A 作如下分解

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & & & 0 \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_{nn} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & & & 0 \\ -a_{21} & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} = D - L - U \quad (1.5)$$

于是,式(1.4)就变成

$$(D - L - U)X = b$$

所以有

$$DX = (L + U)X + b$$

因为 $a_{ij} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$),所以 D 可逆,从而有

$$X = D^{-1}(L + U)X + D^{-1}b$$

写成迭代形式,有

$$X^{(k+1)} = D^{-1}(L + U)X^{(k)} + D^{-1}b \quad (1.6)$$

式(1.6)为 Jacobi 迭代法的矩阵形式,令 $M_1 = D^{-1}(L + U)$, $f_1 = D^{-1}b$,则式(1.6)可表示为

$$X^{(k+1)} = M_1 X^{(k)} + f_1 \quad (1.7)$$

其中 M_1 为 Jacobi 迭代法的迭代矩阵。

二、高斯 - 赛德尔 (Gauss - Seidel) 迭代法

在简单迭代法的迭代式(1.3)中,计算 $x_2^{(k+1)}$ 时,要使用 $x_1^{(k)}$,但此时 $x_1^{(k+1)}$ 已经计算出来,此时可以提前使用 $x_1^{(k+1)}$ 代替 x_1^k 。一般地,计算 $x_i^{(k+1)}$ ($2 \leq i \leq n$) 时,使用 $x_p^{(k+1)}$ 代替 x_p^k ($1 \leq p \leq i$) 能收敛快一些,这样式(1.2)可写成

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}) \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}) \end{cases} \quad (1.8)$$

这称为赛德尔(Seidel)迭代格式,式(1.8)可简写为

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}) \quad i = 1, 2, \dots, n; k = 1, 2, \dots \quad (1.9)$$

为确定计算是否终止,设 ε 为允许的绝对误差限,当满足 $\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \varepsilon$ 条件时,停止计算。下面举一个例子说明该方法。

例1 用迭代法解线性方程组

$$\begin{cases} 2t_1 - t_2 = 500 \\ t_1 - 2t_2 + t_3 = 0 \\ -t_2 + 2t_3 = 100 \end{cases}$$

解 方程组的迭代格式为

$$\begin{cases} t_1^{(k+1)} = \frac{1}{2}(t_2^{(k)} + 500) \\ t_2^{(k+1)} = \frac{1}{2}(t_1^{(k+1)} + t_3^{(k)}) \\ t_3^{(k+1)} = \frac{1}{2}(t_2^{(k+1)} + 100) \end{cases}$$

取 $t_1^{(0)}$ 、 $t_2^{(0)}$ 和 $t_3^{(0)}$ 为 0, 迭代计算结果见表 1.1。当认为计算结果满足精度要求时,计算结束。

表 1.1 迭代计算结果

| k | $t_1^{(k)}$ | $t_2^{(k)}$ | $t_3^{(k)}$ |
|-----|-------------|-------------|-------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 250 | 125 | 111.5 |
| 2 | 311.5 | 211.5 | 156.25 |
| 3 | 356.25 | 256.25 | 178.125 |
| 4 | 378.125 | 278.125 | 189.063 |
| 5 | 389.063 | 289.063 | 194.531 |
| 6 | 394.532 | 294.531 | 197.266 |
| 7 | 397.266 | 297.266 | 198.633 |
| 8 | 398.633 | 298.633 | 199.317 |
| 9 | 399.317 | 299.317 | 199.658 |
| 10 | 399.657 | 299.658 | 199.829 |
| 11 | 399.829 | 299.829 | 199.915 |

利用式(1.5)将式(1.4)变为

$$(D - L)X = UX + b$$

因为 $a_{ij} \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$, 所以 $D - L$ 可逆, 从而有

$$X = (D - L)^{-1}UX + (D - L)^{-1}b$$

其迭代形式为

$$X^{(k+1)} = (D - L)^{-1}UX^{(k)} + (D - L)^{-1}b \quad (1.10)$$

式(1.10)为 Gauss - Seidel 迭代法的矩阵形式, 令 $M_2 = (D - L)^{-1}U$, $f_2 = (D - L)^{-1}b$, 则式(1.10)可表示为

$$X^{(k+1)} = M_2X^{(k)} + f_2 \quad (1.11)$$

其中 M_2 为 Gauss - Seidel 迭代法的迭代矩阵。

三、逐次超松弛(SOR)迭代法

迭代法的基本问题之一是收敛性问题。不收敛的方法是没有任何意义的, 但收敛太慢也是不实用的。逐次超松弛迭代法(简称 SOR 方法)是 Gauss - Seidel 迭代格式的一种加速方法, 是解大型稀疏方程组的有效算法之一。

该方法是利用 Gauss - Seidel 法的分量形式定义新的辅助量 $\tilde{X}^{(k+1)}$, 即

$$\tilde{x}_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[- \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} + b_i \right] \quad (1.12)$$

将它与 $X^{(k)}$ 的第 i 个分量 $x_i^{(k)}$ 加权平均来定义 $x_i^{(k+1)}$, 即

$$x_i^{(k+1)} = \xi \tilde{x}_i^{(k+1)} + (1 - \xi)x_i^{(k)} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1.13)$$

其中 ξ 为系数。将式(1.12)代入式(1.13)得

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\xi}{a_{ii}} \left[- \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} + b_i \right] \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1.14)$$

式(1.14)称为SOR迭代格式,其中 ξ 称为松弛因子。当 $\xi = 1$ 时,则式(1.14)即为 Gauss - Seidel 迭代格式;当 $0 < \xi < 1$ 时,式(1.14)称为低松弛迭代格式;当 $\xi > 1$ 时,式(1.14)称为超松弛迭代格式。适当选择 ξ 的值,可大大提高收敛速度。

1.2 追赶法求解三对角线方程组

设有线性方程组

$$\begin{cases} b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1 \\ a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 = d_2 \\ \vdots \\ a_{n-1} x_{n-2} + b_{n-1} x_{n-1} + c_{n-1} x_n = d_{n-1} \\ a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n \end{cases} \quad (1.15)$$

式(1.15)可写成

$$AX = D$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix}$$

$$X = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n)^T$$

$$D = (d_1, d_2, d_3, \dots, d_{n-1}, d_n)^T$$

由式(1.15)中第一个方程得

$$x_1 = \frac{d_1}{b_1} - \frac{c_1}{b_1} x_2 \quad (1.16)$$

令 $u_1 = d_1/b_1, v_1 = c_1/b_1$, 代入式(1.16)中,得

$$x_1 = u_1 - v_1 x_2$$

由式(1.15)中第二个方程可得

$$x_2 = \frac{d_2 - u_1 a_2}{b_2 - v_1 a_2} - \frac{c_2}{b_2 - v_1 a_2} x_3 \quad (1.17)$$

令 $u_2 = \frac{d_2 - u_1 a_2}{b_2 - \nu_1 a_2}$, $\nu_2 = \frac{c_2}{b_2 - \nu_1 a_2}$, 于是式(1.17) 成为

$$x_2 = u_2 - \nu_2 x_3$$

一般地, 令 $u_k = \frac{d_k - u_{k-1} a_k}{b_k - \nu_{k-1} a_k}$, $\nu_k = \frac{c_k}{b_k - \nu_{k-1} a_k}$, 为了兼容式(1.16), 规定 $u_0 = \nu_0 = 0$, 于是

$$x_k = u_k - \nu_k x_{k+1} \quad (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (1.18)$$

显然, $u_k, \nu_k (k = 1, 2, \dots, n-1)$ 均能逐个求得, 但 x_n 不知道, 故 $x_k (k = n-1, n-2, \dots, 1)$ 尚不能由式(1.18) 求得。为此, 将式(1.15) 中的最后一个方程和式(1.18) 中 $k = n-1$ 时的方程联立

$$\begin{cases} a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n \\ x_{n-1} = u_{n-1} - \nu_{n-1} x_n \end{cases}$$

求得

$$x_n = \frac{d_n - u_{n-1} a_n}{b_n - \nu_{n-1} a_n} = u_n$$

现由

$$\begin{cases} u_0 = \nu_0 = 0 \\ u_k = \frac{d_k - u_{k-1} a_k}{b_k - \nu_{k-1} a_k} \quad (k = 1, 2, \dots, n) \\ \nu_k = \frac{c_k}{b_k - \nu_{k-1} a_k} \end{cases} \quad (1.19)$$

可依次计算出

$$\begin{array}{ccccccc} u_1 & \rightarrow & u_2 & \rightarrow & \dots & \rightarrow & u_{n-1} & \rightarrow & u_n = x_n \\ \nu_1 & & \nu_2 & & & & \nu_{n-1} & & \end{array}$$

计算 u_k, ν_k 的过程称为追的过程, 由式(1.18) 逐个求得原方程组(1.15) 的解

$$x_n \rightarrow x_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow x_1$$

称为赶的过程。以上求解三对角方程组的方法称为追赶法。此法计算量较小, 仅有 $5n - 4$ 次乘除法, 且方法简单, 很适于程序设计。

1.3 三次样条插值函数

插值是一种应用十分广泛的数值方法。实践中常有这样的问题: 由实验得到某一函数 $y = f(x)$ 在一系列点 $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 处的值 $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$, 其函数的解析表达式是未知的, 需要构造一个简单函数 $P(x)$ 作为 $y = f(x)$ 的近似表达式, 该近似表达式应满足:

$$P(x_0) = y_0, P(x_1) = y_1, \dots, P(x_n) = y_n \quad (1.20)$$

这类问题称为插值问题。插值问题与回归问题不同,它要求所求曲线通过所有给定点 (x_i, y_i) ,其中 x_0, x_1, \dots, x_n 称为插值基点; $P(x)$ 称为插值函数;式(1.20)称为插值条件。插值函数提供了一个重要的数学工具,用来计算被插值函数的函数值、极值、导数,并用于数值积分、微分方程数值解等方面。构造插值函数的方法有多种,现仅介绍三次样条插值函数的计算方法。样条(Spline)一词本来是指在飞机和船舶的制造过程中,为了描绘出光滑的外形曲线所用的一种绘图工具,它是一种富有弹性的细长条,使用时,用压铁固定在一些给定的点(称为样点)上,在其他地方让它自由弯曲,然后依样画下光滑的曲线,就称为样条曲线。从数学角度看,在小挠度的假定下,它实际上是由一段一段的三次多项式曲线拼接而成的曲线。在拼接处,不仅函数本身是连续的,而且它的一阶导数和二阶导数也是连续的(但三阶导数一般不是连续的),所以样条曲线具有非常好的光滑性,从数学上加以概括就得到样条函数这一概念。

设对 $y = f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上给定一组节点 $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ 和相应的函数值 y_0, y_1, \dots, y_n ,如果 $S(x)$ 具有如下性质:

- (1) 在每个子区间 $[x_{i-1}, x_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$)上, $S(x)$ 是不高于三次的多项式;
- (2) $S(x), S'(x), S''(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续;
- (3) $S(x_i) = y_i$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$),则称 $S(x)$ 为 $y = f(x)$ 的三次样条插值函数。

确定三次样条插值函数表达式有几种方法,在此介绍系数用基点处二阶导数表示所得到的三次样条插值函数。

$S(x)$ 在子区间 $[x_{i-1}, x_i]$ 上的表达式为 $S_i(x)$ ($i = 1, 2, \dots, n$),这是一个不高于三次的多项式。要确定四个系数,需要四个条件。现在有 $S_i(x_{i-1}) = y_{i-1}$, $S_i(x_i) = y_i$,另外,假定 $S_i''(x_{i-1}) = M_{i-1}$, $S_i''(x_i) = M_i$ 。 $S_i''(x)$ 在区间 $[x_{i-1}, x_i]$ 上是线性函数,由两点式可写出

$$\frac{S_i''(x) - M_{i-1}}{M_i - M_{i-1}} = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$$

$$\text{得} \quad S_i''(x) = M_{i-1} \frac{x_i - x}{h_i} + M_i \frac{x - x_{i-1}}{h_i} \quad (1.21)$$

其中 $h_i = x_i - x_{i-1}$ 。将式(1.21)积分两次,得

$$S_i(x) = M_{i-1} \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + A_i(x - x_i) + B_i \quad (1.22)$$

现在来确定任意常数 A_i, B_i 。由 $S_i(x_{i-1}) = y_{i-1}$,得

$$\frac{M_{i-1}}{6} h_i^2 - A_i h_i + B_i = y_{i-1} \quad (1.23)$$