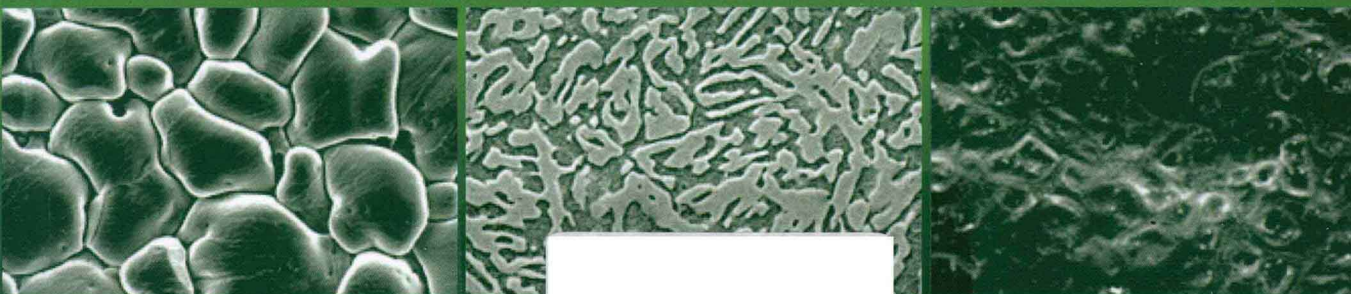


王 军 主编

计算机

在材料热加工工程中的应用

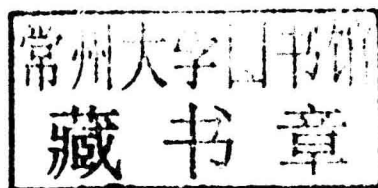


化学工业出版社

计算机在材料热加工 工程中的应用

王 军 主编

孙鹏飞 石春艳 李海涛 副主编



化学工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在材料热加工工程中的应用/王军主编. —北京: 化学工业出版社, 2012. 8
ISBN 978-7-122-14754-7

I. ①计… II. ①王… III. ①计算机应用-金属材料-热加工
IV. ①TG15-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 147282 号

责任编辑: 刘丽宏
责任校对: 蒋 宇

装帧设计: 刘丽华

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)
印 装: 大厂聚鑫印刷有限责任公司
787mm×1092mm 1/16 印张 16 $\frac{1}{4}$ 字数 420 千字 2012 年 10 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899
网 址: <http://www.cip.com.cn>
凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 48.00 元

版权所有 违者必究

前言

FOREWORD

计算机技术的迅猛发展,在当今世界的各个领域日益发挥着巨大作用。计算机技术在材料热加工工程领域得到了广泛的应用,并已成为材料科学与工程领域的技术前沿和最为活跃的研究领域。目前,材料领域除了利用计算机和网络技术进行文献检索与资源共享外,还将计算机应用到了计算机数值模拟、计算机检测和控制、计算机数据与图像处理以及常用材料计算机应用软件等领域,在这些方面引入计算机极大地促进了材料科学与工程研究的深入发展。

本书从实用角度出发,引入简单必要的基础理论,阐明基本方法和基本问题,反映了国内外材料热加工领域计算机应用的状况和最新进展,力求做到内容全面、新颖、系统,并且使具备不同理论知识背景的学生能够快速把握专业方向,理解计算机在材料领域内的各种应用和发展趋势,扩大视野,增长见识,为进入研究生学习或从事本专业有关计算机方面的工作创造理论条件。

本书共计9章。第1章绪论;第2章介绍有限差分法和有限元法的简要理论基础,并通过引入一些简单实例,介绍数值分析方法的一般工作流程;第3章从材料学、材料加工角度介绍温度场、应力场及浓度场的计算方法和实例;第4章从简单的温度控制系统的设计实例出发,介绍经典控制理论必备的简要常识,进而介绍PID数字控制技术,最后介绍PID数字控制技术运用于材料科学与工程领域的实例;第5章初步介绍模糊控制、神经网络控制、专家系统控制的理论基础,并阐述智能控制技术应用于材料热加工领域的实例;第6章介绍Origin软件的基本使用方法和技巧,突出该软件在材料领域的具体应用;第7章简单介绍Photoshop软件的基本使用方法及其在材料领域特别是金相组织分析中的应用;第8章主要介绍网络在材料领域的应用,包括如何查阅论文检索情况、期刊全文和专利情况等;第9章介绍XRD衍射分析软件、SEM扫描电镜及能谱分析软件以及显微硬度分析软件等常用的材料计算机应用软件。本书可作为材料科学与工程专业,特别是一些材料热加工工程专业的本科生教材,也可供从事热加工专业的技术人员参考。

本书由王军主编,由孙鹏飞、石春艳、李海涛副主编。其中,第1、4、5章由王军编写;第2、3章由孙鹏飞编写;第7章、第9章9.1节由李海涛编写;第6、8章、第9章9.2~9.5节由石春艳编写。高晶、袁世丹、田春英也参与了本书部分章节的编写。本书在编写过程中参考了大量的国内外文献资料,在此向援引的参考文献作者一并表示衷心的感谢。

由于编者水平有限,书中的疏漏之处难免,敬请读者批评指正。

编者

目录

CONTENTS

第1章 绪论

1.1 计算机数值模拟在材料热加工工程中的应用	1
1.1.1 材料热加工过程中常用的数值分析方法	1
1.1.2 材料热加工工程中物理场数值模拟	1
1.2 计算机控制在材料热加工工程中的应用	2
1.2.1 计算机经典控制在材料热加工工程中的应用	2
1.2.2 计算机智能控制在材料热加工工程中的应用	2
1.3 计算机数据和图像处理在材料热加工工程中的应用	3
1.3.1 计算机数据处理在材料热加工工程中的应用	3
1.3.2 计算机图像处理在材料热加工工程中的应用	3
1.4 计算机网络在材料热加工工程中的应用	3
1.5 各种计算机应用软件在材料热加工工程中的应用	4

第2章 材料热加工工程中常用数值分析方法

2.1 有限差分法	5
2.1.1 差分原理	5
2.1.2 相容性、收敛性和稳定性	7
2.1.3 有限差分法在材料热加工工程中的应用	10
2.2 有限元法	10
2.2.1 有限元程序的结构和特点	11
2.2.2 有限元法在材料热加工工程中的求解简例	12

第3章 材料热加工工程中物理场数值模拟

3.1 温度场数值模拟	17
3.1.1 温度场数值模拟简要理论	17
3.1.2 铸造加工温度场数值模拟	35
3.1.3 焊接加工温度场数值模拟	39
3.2 应力场数值模拟	45
3.2.1 应力场数值模拟简要理论	45
3.2.2 铸造加工应力场数值模拟	51

3.2.3	焊接加工应力场数值模拟	53
3.3	浓度场数值模拟	54
3.3.1	浓度场数值模拟简要理论	55
3.3.2	铸造加工浓度场数值模拟	59
3.3.3	焊接加工浓度场数值模拟	60

第4章 计算机经典控制在材料热加工工程中的应用

4.1	一个简单的温度控制系统设计实例	63
4.1.1	总体设计方案	63
4.1.2	单片机接口设计	64
4.1.3	系统整体设计	65
4.1.4	系统调试	67
4.2	经典控制简要理论	68
4.2.1	自动控制系统的组成和基本类型	68
4.2.2	开环控制与闭环控制	72
4.2.3	自动控制系统数学模型	73
4.2.4	传递函数	76
4.2.5	自动控制系统方框图	79
4.3	PID 控制简要理论	80
4.3.1	模拟 PID 控制原理	80
4.3.2	数字 PID 控制原理	81
4.4	PID 计算机数字控制在材料热加工工程中的应用	85
4.4.1	热处理加工计算机数字控制	85
4.4.2	铸造加工计算机数字控制	87
4.4.3	焊接加工计算机数字控制	92

第5章 计算机智能控制在材料热加工工程中的应用

5.1	概述	101
5.2	模糊控制在材料热加工工程中的应用	102
5.2.1	模糊控制简要理论	102
5.2.2	模糊控制器	103
5.2.3	计算机模糊控制在铸造加工中的应用	106
5.2.4	计算机模糊控制在焊接加工中的应用	110
5.3	神经网络控制在材料热加工工程中的应用	113
5.3.1	神经网络控制基础	113
5.3.2	神经网络控制在材料热加工工程中的应用	117
5.4	专家智能控制在材料热加工工程中的应用	122
5.4.1	专家控制系统简要理论	122
5.4.2	热处理加工计算机专家智能控制	123
5.4.3	铸造加工计算机专家智能控制	125
5.4.4	焊接加工计算机专家智能控制	126

第6章 Origin软件在材料科学与工程中的应用

6.1 Origin 软件简要介绍	130
6.2 Origin 软件常用数据处理方法和技巧	130
6.3 Origin 软件常用绘图方法和技巧	133
6.4 Origin 软件在材料热加工工程中的应用	140
6.4.1 Origin 软件在热处理加工中的应用	140
6.4.2 Origin 软件在铸造加工中的应用	143
6.4.3 Origin 软件在焊接加工中的应用	144

第7章 Photoshop在材料热加工工程中的应用

7.1 Photoshop 软件简要介绍	151
7.2 Photoshop 软件常用使用方法和技巧	151
7.3 Photoshop 软件在材料科学与工程中的应用	156
7.3.1 Photoshop 软件在材料科学中的应用	156
7.3.2 Photoshop 软件在铸造加工中的应用	157
7.3.3 Photoshop 软件在焊接加工中的应用	159

第8章 计算机网络在材料科学与工程中的应用

8.1 计算机网络简要介绍	162
8.1.1 计算机网络技术	162
8.1.2 计算机网络基本服务功能	163
8.1.3 计算机网络 TCP/IP	166
8.1.4 计算机网络安全	167
8.2 计算机网络材料科学与工程信息资源的检索和利用	167
8.2.1 材料科学与工程信息资源的网络检索	167
8.2.2 网络数据库在材料科学与工程中的应用	173
8.3 材料科学文献检索	174
8.3.1 索引数据库	174
8.3.2 全文数据库	177
8.3.3 专利文献检索系统	181

第9章 热加工工程相关常用软件的使用

9.1 XRD 衍射分析软件的使用	188
9.1.1 XRD Commander	188
9.1.2 MDI Jade 软件	191
9.1.3 EVA 软件	205
9.2 二元相图软件的使用	214
9.2.1 二元相图软件数据库	214
9.2.2 二元相图计算软件的使用	215

9.3 扫描电镜分析软件及能谱分析软件的使用	218
9.3.1 扫描电镜分析软件的使用	218
9.3.2 能谱分析软件的使用	221
9.4 显微硬度分析软件的使用	224
9.4.1 显微硬度分析软件界面介绍	224
9.4.2 显微硬度计的使用	233
9.5 力学性能分析软件的使用	233
9.5.1 力学性能分析软件界面介绍	233
9.5.2 力学性能分析软件的使用	234
参考文献	247

第1章

绪论

1.1 计算机数值模拟在材料热加工工程中的应用

1.1.1 材料热加工过程中常用的数值分析方法

随着社会和其他相关支柱产业的发展,材料热加工工业得到了迅速的发展,新工艺、新技术、新设备和新产品层出不穷。利用计算机等现代设计分析手段进行数值模拟受到行业内的高度重视。将微分方程的求解域进行离散化,将原来欲求得在求解域内处处满足场方程、在边界上处处满足边界条件的解析解的要求降低为求得在给定的离散点(节点)上满足由场方程和边界条件所导出的一组代数方程的数值解。将连续的、无限自由度问题变成离散的、有限自由度问题。数值模拟方法可以分为有限差分法,有限元法两大类。有限差分法是在数学上将微分方程用差分方程代替,而后进行数值运算,可以将其看成是数学上的近似。有限元法求得的模型化了的结构数值精确解,可以看成是物理上的近似。

1.1.2 材料热加工工程中物理场数值模拟

材料热加工工程技术与加热、冷却等传热过程密切相关。包括铸造、焊接等各种材料加工技术都会将温度场作为研究工艺机理的起始点。采用计算机数值模拟技术解决传热问题是材料热加工工程技术的重要课题。这已经获得行业内广泛认同。可以将材料加工工程中所满足的数学方程和定解条件抽象成理论模型,采用电子计算机求得该理论模型在不同条件下的数值解,以此推测在相应条件下所发生的实际过程。模拟应力场时,力学模型至关重要。如在生产中常见的缺陷,如裂纹、气孔、变形等都是由于工件的结构或者工艺不合理,在加工过程中产生的与热应力有关的现象。对热加工过程进行热应力场数值模拟,可以预测加工过程中应力和变形的动态变化,残余应力的分布状况。目前,热加工过程应力数值模拟研究主要集中在加工进行完以后的阶段,用来计算残余应力和残余变形。由材料基础可知,任何不均质的材料,在热力学允许的条件下,都将趋向于均匀化。譬如,通过扩散退火可以改善因凝固带来的不均匀性,这正是合金中分布不均匀的溶质原子从高浓度区域向低浓度区域运动的结果。扩散现象在工程中广泛存在,如压力加工时的动态恢复再结晶、双金属板的生产、焊接过程、热处理中的相交、化学热处理、粉末冶金的烧结以及氧化、蠕变等。热加工过程重点讨论扩散物质的浓度分布与时间的关系,即扩散速度问题,根据不同条件建立了一

系列的扩散方程。可以利用热传导问题的结果,根据扩散过程的初始条件和边界条件不同进行数值求解。本书从温度、应力、浓度三个角度对热加工工程的数值模拟进行简要的理论分析,对实际铸造、焊接等材料热加工过程进行的数值模拟应用进行了阐述。

1.2 计算机控制在材料热加工工程中的应用

1.2.1 计算机经典控制在材料热加工工程中的应用

控制系统就是指能够对被控制对象的工作状态进行自动控制的系统。它一般由被控制对象和控制装置组成。对象是指需要实现自动控制的元件、设备或生产工艺过程;而控制是指对被控制对象起控制作用的设备总和。控制量只能受控于输入量,而对输入量不能反施加任何影响的系统叫做开环控制系统。利用负反馈得到的偏差产生的控制作用,又去消除偏差的控制原理叫做反馈控制,这种输入和输出间存在负反馈的系统叫闭环控制系统。描述自动控制系统内部各物理量之间关系的数学表达式为控制系统模型。可以利用传递函数的概念来描述和分析经典控制系统。控制系统设计的关键就是如何将偏差信号进行相应的处理后输送给执行环节,使控制系统达到稳、准、快的标准。PID控制在生产过程中是一种最普遍采用的对偏差信号进行处理的控制方法,在材料及加工过程中获得广泛应用。本书介绍PID控制的基本原理、数字PID控制算法及其改进和几种常用的数字PID控制系统,并给出其在铸造、焊接等材料热加工工业中的应用实例。

1.2.2 计算机智能控制在材料热加工工程中的应用

智能控制是传统控制发展的高级阶段,用来解决用传统方法难以解决的复杂系统的控制,如智能机器人系统、复杂工业过程控制系统、航空航天控制系统、交通运输系统等。智能控制包含多项技术,现已提出了专家控制、模糊控制、神经网络控制等多种方法。其目的是提高系统的鲁棒性、容错性和解决具有严重非线性和不确定性系统的控制问题。智能控制与常规PID控制相结合,形成智能PID控制,具有不依赖系统精确数学模型的特点,对系统的参数变化具有较好的鲁棒性。模糊控制是基于模糊集合论,模拟人的模糊推理和决策过程的一种实用的控制方法。它是以模糊数学、模糊语言形式的知识表示和模糊逻辑的规则推理为理论基础,采用计算机控制技术构成的一种具有反馈通道的闭环结构的数字控制系统。它的组成核心是具有智能性的模糊控制器,这也就是它与其他自动控制系统的不同之处。该控制技术不要求掌握受控对象的精确数学模型,而根据人工控制规则组织控制决策表,然后由该表决定控制量的大小。人工神经网络技术则是以一种简单计算处理单元(即神经元)为节点,采用某种网络拓扑结构构成的活性网络,用来描述几乎任意的非线性系统;它还具有学习能力、记忆能力、计算能力以及各种智能处理能力,在不同程度和层次上模仿人脑神经网络的信息处理、存储和检索的功能。专家控制系统是相当于(领域)专家处理知识和解决问题能力的计算机智能软件系统。它不仅是独立的决策者,而且还是具有获得反馈信息并能实时在线控制的系统。它是将专家系统的理论和技术同控制理论方法与技术相结合,在未知环境下,仿效专家的智能,实现对系统的控制。它也具备对环境的变化有很强的自适应能力和自学习功能,具有高可靠性及长期运行的连续性、在线控制的实时性等特点。本书将介绍上述先进智能控制技术简要理论及其在材料热加工领域的应用。

1.3 计算机数据和图像处理在材料热加工工程中的应用

1.3.1 计算机数据处理在材料热加工工程中的应用

材料科学工作者从实验中得到的原始数据，不仅需要大量保存和能快速查找，而且更为重要的是可以对数据作进一步的后续处理。如今，可用于数据处理、计算、绘图的软件很多，如 Origin、Matlab、Chemwin、Chemoffice、Photoshop 等。本章将详细介绍 Origin 软件，使读者掌握这款数据处理软件的使用方法。Origin 是一款具有较强数据分析和绘图的软件。它具有方便、直观、简单等特点，非常适用于进行大量数据处理及绘图的材料科学工作者。本书以 Origin6.0 版本为例，介绍 Origin 软件的基本功能。该软件可将实验数据生成二维坐标的图形；在同一幅图中显示多条实验曲线；不同的实验曲线选择不同的线型和不同的实验点符号；对坐标轴进行命名，并选择合适的字体大小和类型；将实验数据进行回归计算，并打印回归方程和偏差；以多种形式保存生成的图形；使用多个坐标轴，并可对坐标轴位置、大小进行选择修改。它不仅具有绘图功能，还具有强大的数据分析功能。进行数据分析时，只需准备好数据，选择所要分析的数据，然后再选择相应的菜单命令即可。总之，Origin 是一个功能非常齐全的软件，对于绘制实验曲线十分有用。本章只重点介绍 Origin6.0 版本的数据处理和绘图部分的方法和应用实例，这部分功能尤其适用于材料科学技术研究人员。

1.3.2 计算机图像处理在材料热加工工程中的应用

AdobePhotoshop 是专业的图像编辑软件。其功能更加完善，尤其是拥有大量可以自行设置的创新工具、丰富的图形工具，可用于对数码相机图片的处理、印刷品的制作、Web 设计和视频制作等。Photoshop 的主要功能可以划分为 4 个方面：对图像中像素数、像素值进行整体的调整，包括改变图像的尺寸、颜色及明暗色调等；对图像的局部进行调整；绘制图形；制作特效。在材料科学研究工作中，往往需要对材料表面状态变化进行对比研究。往往需要用到各种显微镜检测手段，如扫描电子显微镜、原子力显微镜等。检测后得到了材料表面状态图像，仪器自带的软件可以处理图像，材料科学工作者也可以利用 Photoshop 软件进行更深入的图像处理，从而得到更好的效果。本书主要介绍 Photoshop CS2 的操作界面及在材料科学研究中常用的图像处理技术。对于 Photoshop 中其他图像处理方法，读者可参考有关的书籍进行学习。

1.4 计算机网络在材料热加工工程中的应用

Internet 是人类历史发展的里程碑，是人类通信史上的第四次革命，人类也由此进入了信息化社会。同样，在材料科学发展的历史长河中，积累了大量的实验现象、数据和文献资料。记录和传递这些信息的方法也经历了从口授、书面方式、信息记录和传递的电子化时代的发展。计算机网络的资源共享功能使接入网的所有用户均能享受网内的计算机系统的全部或部分资源，从而使网络各地区的资源互通有无、分工协作，达到提高系统资源的利用率。材料研究与应用所涉及的领域非常广泛，除了大量的材料学专业信息以外，还包括化学、数学、机械、冶金和环境等方面，这些信息数据类型多样，而且地理上、组织上分散。

如何在 Internet 上快速、准确、全面地获取相关信息成为需要迫切解决的问题。Internet 上丰富的材料科学信息资源，除了一些通用信息检索的网站外，还包括很多专门针对材料科学领域的综合性信息网站，为材料研究工作者提供了研究文献、数据库、专利等信息资源。本书对此问题主要介绍 Internet 上各类材料信息资源的检索方法，包括一些材料有关网站、搜索引擎、材料网络数据库、材料期刊文献、专利检索等内容。

1.5 各种计算机应用软件在材料热加工工程中的应用

X 射线衍射是物质表征和质量控制不可缺少的方法，应用领域极其广泛，在物质结构鉴定和研究中起着决定性的作用，常用于对物质的组成和原子尺度量级的结构进行鉴定和研究。历史上，从发现 X 射线衍射到应用 X 射线衍射解决物理、化学、材料、生命、医学等方面的问题，获得 10 余次诺贝尔奖。由于现代 X 射线衍射实验技术的不断完善，数据处理自动化程度越来越高，计算机测试、分析软件的应用受到人们的欢迎。本书以 XRD Commander、MDI Jade 和 Diffrac plus EVA（简称 EVA）三种应用软件为例，介绍经过材料热加工过程所获得试样是如何进行物相分析的。相图是材料科学研究重要的依据，Thermo-calc 系统是典型的相图计算软件，包括有 SGTE 纯物质数据库、SGTE 盐数据库、SGTE 溶液数据库、KAUFMAN 合金数据库、FEBASE 铁基合金数据库和 ISHIDA: III-V 族化合物数据库等多种数据库。对其进行充分利用，可以迅捷地从理论上对材料加工的可行性进行判断，对其所获得的结果进行预测。本书还介绍了一些力学性能测试软件的使用方法，大大方便了材料加工专业同学进行试验。

第2章

材料热加工工程中常用数值分析方法

随着社会经济和其他相关支柱产业的发展,材料加工业得到了迅速的发展,新工艺、新技术、新设备和新产品层出不穷。根据传统的成形工艺,采用基于经验的试错设计方法已不能满足实际需要,引入以计算机为工具的现代设计分析手段已成为人们的共识,计算机数值模拟技术受到世界各国尤其是发达国家的高度重视。数值模拟方法的基本特点是将微分方程的求解域进行离散化,将原来欲求得在求解域内处处满足场方程、在边界上处处满足边界条件的解析解的要求降低为求得在给定的离散点(节点)上满足由场方程和边界条件所导出的一组代数方程的数值解。这样,就使一个连续的、无限自由度问题变成离散的、有限自由度问题。已经发展的数值模拟方法可以分为两大类:一类以有限差分法为代表,另一类以有限元法为代表。有限差分法与有限元法都是近似解法,但二者近似的本质是不同的。微分方程式能正确反映所需分析的连续体的规律,有限差分法是在数学上将微分方程用差分方程代替,而后进行数值运算,因此有限差分法可看成是数学上的近似。有限元法则是在物理上作了近似,它得到的结果是模型化结构的数值精确解。

2.1 有限差分法

有限差分法(Finite Differential Method)是数值求解微分问题的一种重要工具,很早就有人在这方面做了一些基础性的工作,伽利略从著名的斜面实验中得到的自由落体定律就是最早用来描述自由落体运动的有限差分方程。但是在电子计算机问世前,研究重点在于确定有限差分解的存在性和收敛性。20世纪40年代后半期出现了电子计算机后,有限差分法得到迅速的发展,并在传热分析、流动分析、扩散分析等领域取得了显著的成就,

有限差分法在材料成型领域应用较为普遍,目前材料加工中的传热分析,流动分析都可以以有限差分法进行模拟分析,特别是在流动场分析方面,有限差分法有独特的优势,因此目前进行的流体力学数值分析,绝大多数都是基于有限差分法。

随着计算机技术的飞速发展,有限差分法必将得到更为广泛的应用,为材料成型过程提供更加全面、有效的指导。

2.1.1 差分原理

差分方法的基本要求是差分方程能准确地代表微分方程。有限差分法的近似处理会引进

误差, 包括差分方程的截断误差、差分方程解的离散误差, 以及计算过程中引入的舍入误差。这些误差对计算过程和计算结果的影响反映在差分方程的数学特性上。与此相应的是差分方程的相容性、收敛性和稳定性。

假设有函数 $y=f(x)$, 由微分学可知 y 对 x 的导数为

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (2-1)$$

式中, dy 、 dx 分别为函数及自变量的微分; $\frac{dy}{dx}$ 为函数对自变量的导数, 又称微商;

Δy 、 Δx 分别为函数及自变量的差分, $\frac{\Delta y}{\Delta x}$ 为函数对自变量的差商。

在差分方法中, Δx 总是取某一小的正数, 与微分对应的差分可以有 3 种形式:

$$\text{向前差分} \quad \Delta y = f(x + \Delta x) - f(x) \quad (2-2)$$

$$\text{向后差分} \quad \Delta y = f(x) - f(x + \Delta x) \quad (2-3)$$

$$\text{中心差分} \quad \Delta y = f\left(x + \frac{1}{2}\Delta x\right) - f\left(x - \frac{1}{2}\Delta x\right) \quad (2-4)$$

对应于一阶导数的差分称为一阶差分。函数的差分与自变量的差分之比, 即为函数对自变量的差商。如

$$\text{一阶向前差商为} \quad \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (2-5)$$

$$\text{一阶向后差商为} \quad \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \quad (2-6)$$

$$\text{一阶中心差商为} \quad \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f\left(x + \frac{1}{2}\Delta x\right) - f\left(x - \frac{1}{2}\Delta x\right)}{\Delta x} \quad (2-7)$$

$$\text{或} \quad \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (2-8)$$

由定义可知, 当自变量的差分趋近于零时, 就可由差商得到导数, 在数值计算中常用差商近似代替导数。差商与导数之间的误差表明差商逼近导数的程度, 称为逼近误差。由函数的泰勒展开, 可以得到逼近误差相对于自变量差分的量级, 称为用差商代替导数的精度, 简称为差商的精度。

现将函数 $f(x + \Delta x)$ 在 x 的 Δx 邻域作泰勒展开:

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} f''(x) + \frac{(\Delta x)^3}{3!} f'''(x) + \frac{(\Delta x)^4}{4!} f^{(4)}(x) + o[(\Delta x)^5]$$

$$\begin{aligned} \text{因此} \quad \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} &= f'(x) + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x) + \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^2 + \frac{f^{(4)}(x)}{4!}(\Delta x)^3 + o[(\Delta x)^4] \\ &= f'(x) + o(\Delta x) \end{aligned} \quad (2-9)$$

上式表明一阶向前差商的逼近误差与自变量的增量同量级。其中 $o((\Delta x)^n)$ 中 Δx 的指数 n 作为精度的阶数, 这里 $n=1$, 故一阶向前差商具有一阶精度。

$$\text{又} \quad f(x - \Delta x) = f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} f''(x) - \frac{(\Delta x)^3}{3!} f'''(x) + \frac{(\Delta x)^4}{4!} f^{(4)}(x) + o[(\Delta x)^5]$$

$$\text{因此} \quad \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} = f'(x) + o(\Delta x) \quad (2-10)$$

一阶向后差商也具有一阶精度。

将 $f(x+\Delta x)$ 与 $f(x-\Delta x)$ 的泰勒展开式相减可得

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} = f'(x) + o[(\Delta x)^2] \quad (2-11)$$

可见一阶中心差商具有二阶精度。

2.1.2 相容性、收敛性和稳定性

由上所述，差分相应于微分，差商相应于导数。差分 and 差商是用有限形式表示的，而微分和导数则是以极限形式表示的。如果将微分方程中的导数用相应的差商近似代替，就可得到有限形式的差分方程。

用有限差分法对基本方程组积分时，以差商代替微商，把微分方程组写成差分方程组，使有限差分的“网格”覆盖连续区域，在网格的交点（节点）上定义有限差分解，列出差分方程组之前，先把连续空间转换为离散的空间网格，以对流扩散方程为例，列出其对应的差分方程

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \alpha \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (2-12)$$

用差商近似代替导数时，首先要选定 Δx 和 Δt ，称为步长。然后在 $x-t$ 坐标平面上用平行于坐标的两组直线

$$x_i = x_0 + i\Delta x, \quad i=0, 1, 2, \dots$$

$$t_n = n\Delta t, \quad n=0, 1, 2, \dots$$

划分出矩形网格，如图 2-1。通常空间步长 Δx 取为相等的，而时间步长 Δt 与 Δx 以及 α 有关，当 Δx 和 α 为常数时， Δt 也取常数。直线 $t=t_n$ 称为第 n 层。网格交叉点称为节点。

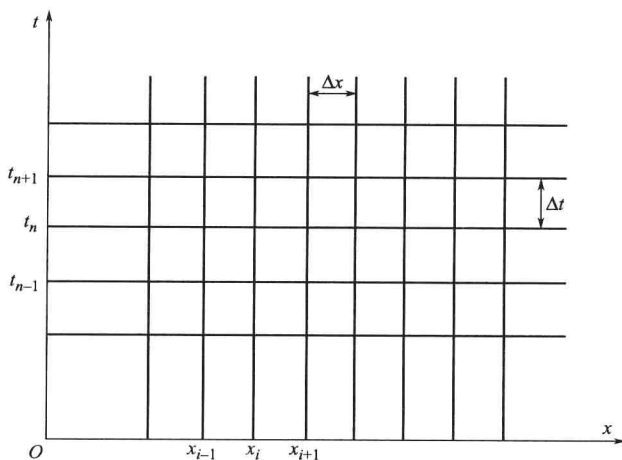


图 2-1 差分网格

网格划定后，就可针对某一节点，如图 2-1 中的节点 (x_i, t_n) ，用差商近似代替导数，则对流方程在 (x_i, t_n) 点为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i^n + \alpha \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i^n = 0 \quad (2-13)$$

这里 α 是作常数处理的。若时间导数用一阶向前差商近似代替，即

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i^n = \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} \quad (2-14)$$

空间导数用一阶中心差商近似代替，即

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i^n = \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x} \quad (2-15)$$

则在 (x_i, t_n) 点的对流方程就可近似地写作

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + a \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (2-16)$$

这就是对应的差分方程。

根据逼近误差的分析可知，用时间向前差商代替时间导数时的误差为 $o(\Delta t)$ ，用空间中心差商代替空间导数时的误差为 $o[(\Delta x)^2]$ ，因而对流方程与对应的差分方程直接也存在一个误差，它是

$$R_i^n = o(\Delta t) + o[(\Delta x)^2] = o[\Delta t, (\Delta x)^2] \quad (2-17)$$

这种用差分方程近似代替微分方程所引起的误差，称为截断误差。

(1) 相容性

一般来说，若微分方程为 $At = 0$ (2-18)

其中， A 表示某种算子， t 为定义在求解域上的函数，而对应的差分方程为

$$A\Delta t_i^n = 0 \quad (2-19)$$

其中， Δt_i^n 是 t 在网格点 (i, n) 上的值。对于固定点 (x_i, t_n) ，则截断误差为

$$R = L\Delta t_i^n - (Lt)_i^n \quad (2-20)$$

这里 t 是定义域上某一足够光滑的函数，当然也可以取微分方程的解。

当 $\Delta x \rightarrow 0$ ， $\Delta n \rightarrow 0$ 时，差分方程的截断误差对于每一点 (i, n) 都趋于零，则称此差分方程 $L\Delta t_i^n = 0$ 逼近微分方程 $Lt = 0$ ，称这样的差分方程和相应的微分方程相容。相容性反映差分方程趋近于微分方程的精确程度。

上面考虑了方程的相容性，下面考虑定解条件的相容性。若微分问题的定解条件为

$$B\theta = 0 \quad (2-21)$$

式中 B ——微分算子；

θ ——已知函数。

而对应的差分问题的定解条件为

$$B\Delta\theta = 0 \quad (2-22)$$

则截断误差为 $r = B\Delta\theta - B\theta$ (2-23)

当 $\Delta x \rightarrow 0$ ， $\Delta n \rightarrow 0$ 时，只有方程相容，定解条件也相容，整个问题才相容。 $\Delta x \rightarrow 0$ ， $\Delta n \rightarrow 0$ 的情况有两种：一种是各自独立地趋于零，这是无条件相容；另一种是 Δx 与 Δn 之间在某种关系下同时趋于零，这种情况下的相容为条件相容。差分方程必须满足相容性，不满足相容性的差分方程不能采用。

(2) 收敛性

相容性反映的是差分方程趋近于微分方程的精确程度，在此基础上，还进一步要求差分格式的解（精确解）与微分方程定解问题的解（精确解）是一致的。即当步长趋于零时，要求差分格式的解趋于微分方程定解问题的解，这种是否趋于微分方程定解问题的解的情况称为差分格式的收敛性。收敛性反映的是差分法产生的解随着网格间距减小到零而逼近微分方程解的速度。

以一维扩散方程为例，讨论差分方程解的收敛性。取网格上差分方程的解为 f_i^n ，微分方程的解为 $(f)_i^{n+1}$ ，则差分方程为

$$f_i^{n+1} = \sigma f_{i+1}^n + (1 - 2\sigma) f_i^n + \sigma f_{i-1}^n \quad (2-24)$$

式中, 符号
$$\sigma = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

把微分方程的解用泰勒级数展开得

$$(f)_i^{n+1} = \sigma (f)_{i+1}^n + (1-2\sigma)(f)_i^n + \sigma (f)_{i-1}^n + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \quad (2-25)$$

用式(2-24) 减去式(2-25) 得

$$e_i^{n+1} = \sigma e_{i+1}^n + (1-2\sigma)e_i^n + \sigma e_{i-1}^n + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \quad (2-26)$$

将式(2-26) 各项取绝对值可得

$$|e_i^{n+1}| \leq \sigma |e_{i+1}^n| + |(1-2\sigma)e_i^n| + \sigma |e_{i-1}^n| + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \quad (2-27)$$

$$\text{令} \quad E^{(n)} = \max_{\forall i} \{|e_i^n|\} \quad (2-28)$$

若 $\sigma = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$, 则有 $|e_i^{n+1}| \leq E^{(n)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t$, $E^{(n+1)} \leq E^{(n)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t$

对各个时刻依次写出

$$\begin{aligned} E^{(n)} &\leq E^{(n-1)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \\ E^{(n-1)} &\leq E^{(n-2)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \\ E^{(n-2)} &\leq E^{(n-3)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \\ E^{(n-3)} &\leq E^{(n-4)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \\ &\dots \\ E^{(1)} &\leq E^{(0)} + O(\Delta t, \Delta x^2) \Delta t \end{aligned}$$

$$\text{将以上各式相加, 得 } E^{(n)} \leq E^{(0)} + O(\Delta t, \Delta x^2) n \Delta t \quad (2-29)$$

如果起始时刻无误差或至少误差有界, 则当 $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$ 时, 在给定时刻 $T = n \Delta t$, 有 $E^{(n)} \rightarrow 0$ 或 $E^{(n)}$ 有界。可见在 $\sigma = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$ 这个条件下, 一维扩散方程的差分格式解收敛到微分方程的解。

对于差分方程来说, 大部分的差分格式都是相容的, 但不一定总是收敛, 因此收敛性比相容性有更严格的要求。

(3) 稳定性

在有限差分法具体运算的过程中, 诸如舍入误差之类的计算误差总是不可避免的, 人们通过大量的实践和理论分析发现, 同一问题的各种差分格式在某一条条件下, 对误差的敏感程度不一样。有时随着计算时间的延续, 舍入误差能控制在一定的有限范围内, 对以后的影响越来越小; 有时舍入误差不断增长, 所产生的影响在数值上将越来越大。数值上的差别引出了质的不同, 因而出现了稳定性问题。如果计算中某处产生的误差对以后的影响越来越小, 或是这个影响保持在某个限度某种情况内, 那么就称这个差分格式在给定的条件下稳定, 这个条件就是它的稳定准则。如果误差的影响随着时间的增加越来越大, 使计算的结果随着时间的增加越来越偏离差分格式的精确解, 毫无实用价值, 那么这种情况就是不稳定的。实践表明, 有些差分格式在一定条件下稳定; 有些差分格式在任何条件下都不稳定, 称为完全不稳定; 有些差分格式是无条件稳定的, 称为完全稳定。

现给出稳定性的数学定义, 为此将差分解 ξ_i^n 表示为连续函数 $Z(x, t)$, 则稳定性的一种定义为

$$\|Z(x, t)\| \leq K \|Z(x, 0)\| \quad (2-30)$$

上式中, K 是某个有限常数, 称为 Lipschitz 常数, 不随 $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ 而变。也就是说, 当上述不等式成立时, 只要差分问题初始值所含的误差为小量时, 此后的解与差分问题的精确解的误差也一定为小量。由于计算误差不仅可以来自初值, 还可以来自边界值, 所以