



普通高等教育“十五”国家级规划教材

材料成形计算机模拟

第2版

● 上海交通大学 董湘怀 主编



材料成形计算机模拟

第 2 版

主 编	董湘怀		
参 编	陈立亮	王桂兰	刘建生
	李付国	刘瑞祥	
主 审	孙 胜	张端明	

机械工业出版社

本书首先系统地介绍了有限差分法和有限元法这两种主要的数值分析方法的观念、公式和实施步骤，主要内容包括温度场及流动问题的有限差分分析，弹性、弹塑性及刚塑性问题的有限元分析等，然后介绍了数值分析方法在铸造、锻压等材料成形过程的计算机模拟中的应用，这些内容将为读者提供应用模拟软件分析工程问题所必需的较为完整的知识。

本书是为高等院校专业调整后的材料成形及控制工程专业本科生编写的教材，也可供材料学科、机械学科有关专业的师生以及从事材料加工和机械制造的科技人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

材料成形计算机模拟/董湘怀主编. —北京: 机械工业出版社, 2005

普通高等教育“十五”国家级规划教材

ISBN 7-111-09629-0

I. 材… II. 董… III. 工程材料-成形-计算机模拟-高等学校-教材 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 135359 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑: 张祖凤

责任编辑: 王小东 版式设计: 霍永明 责任校对: 吴美英

封面设计: 饶 薇 责任印制: 洪汉军

北京京丰印刷厂印刷

2006 年 2 月第 2 版·第 1 次印刷

1000mm×1400mm B5·6.375 印张·245 千字

定价: 16.50 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

本社购书热线电话 (010) 68326294

封面无防伪标均为盗版

第2版前言

推行专业改革,为社会培养综合素质高、知识结构全面的栋梁之材,在很大程度上取决于教材建设。教育部颁布新的专业目录后,机械工业出版社成立了以华中科技大学为牵头单位的系列教改教材编审委员会,共同组织编写材料成形及控制工程专业系列教材以满足专业调整之后的材料成形及控制工程大专业的教学需要本书第1版即是该系列教材中的一本,出版后,被一些高校选用为大学本科或硕士研究生的教材。

本书被列为普通高等教育“十五”国家级规划教材,修订时,我们对第1版的某些错误进行了订正,同时对全书的编排进行了调整,将主要内容分为理论基础与实际应用两部分。其中第二~五章为理论基础部分,第六、七章为应用技术部分。第一章概述了数值模拟技术的基本概念和发展,说明了本书的使用方法;第二章介绍有限差分法的基本知识,为应用有限差分法奠定理论基础;第三章通过线性弹性力学问题,介绍有限元法的基本概念、基本公式和分析计算步骤,并阐述了有限元法的一般意义;第四章介绍弹塑性有限元法,阐述了材料非线性和几何非线性问题的处理方法;第五章介绍刚塑性有限元法,还包括刚粘塑性有限元法和热传导问题的有限元法;第六章介绍铸造过程的温度场和铸件充型过程数值模拟技术;第七章介绍塑性成形过程的数值模拟技术,内容包括冲压成形与体积成形过程的数值模拟。

本书的主编为上海交通大学董湘怀(第一章部分、第三章、第七章第一~三节)。参编人员有华中科技大学陈立亮(第一章部分,第二章)、华中科技大学王桂兰(第四章)、太原重型机械学院刘建生(第五章第一~三节、第七章第四节第二小节)、西北工业大学李付国(第五章第四节、第七章第四节第一小节)、华中科技大学刘瑞祥(第六章)。

本书的主审为山东大学孙胜教授(第一、三、四、五、七章)和华中科技大学张端明教授(第二、六章)。

鉴于作者水平所限,修订后书中难免仍有不当之处,敬请读者批评指正。

编 者

2005年8月

第1版前言

为了适应国家教育改革形势的发展,根据教育部最新颁布的新的专业目录,全国大部分工科院校已将原热加工专业的铸造、焊接、锻压、热处理四个专业合并为材料成形及控制工程大专业。1998年12月,教育部热加工专业教学指导委员会在哈尔滨召开年会,探讨了专业改造和教材建设的问题。

推行专业改革,为社会培养综合素质高、知识结构全面的栋梁之材,在很大程度上取决于教材建设。教育部颁布新的专业目录已有一段时间,经过这一阶段的摸索和探讨,对材料成形及控制工程专业的改造和教材建设,各高校观点和方法逐渐趋于大同,在这个基础上,编写一套普通高等教育材料成形及控制工程专业系列教改教材是适时的。为此,机械工业出版社教材编辑室成立了以华中科技大学为牵头单位的系列教改教材编审委员会,共同组织编写材料成形及控制工程专业系列教材。

本书主要介绍有限元法和有限差分法在材料成形计算机模拟中的应用。

第一章概述了数值模拟技术的基本概念和发展,说明了本书的使用方法。从第二章开始介绍两种主要的数值分析方法,其中第二章至第四章为有限元部分,第五章至第七章为有限差分部分。第二章通过弹性力学问题,介绍有限元法的基本概念、基本公式和分析计算步骤,并阐述了有限元法的一般意义。第三章介绍弹塑性有限元法,阐述了材料非线性和几何非线性问题的处理方法。第四章介绍刚塑性有限元法,还包括刚粘塑性有限元法和热传导问题的有限元法。第五章介绍有限差分法的基本知识,为应用有限差分法奠定理论基础。第六章以铸件温度场数值模拟技术为例,讲述有限差分法在实际中的应用。第七章重点介绍了铸造领域的最新研究成果——铸件充型过程数值模拟技术。

本书的主编为华中科技大学董湘怀(第一章部分内容、第二章)。参编人员有华中科技大学王桂兰(第三章)、太原重型机械学院刘建生(第四章第一、二、三节)、西北工业大学李付国(第四章第四、五、六节)、华中科技大学陈立亮(第一章部分内容、第五章)、华中科技大学刘瑞祥(第六章、第七章)。本书的主审为山东大学孙胜教授(第一、二、三、四章)和华中科技大学张端明教授(第五、六、七章)。

鉴于作者水平所限,书中难免有不当之处,敬请读者批评指正。

编者

目 录

第 2 版前言

第 1 版前言

第一章 绪论	1
第一节 材料成形数值模拟概述	1
第二节 本书的编写和使用说明	3
第二章 有限差分法	5
第一节 差分原理及逼近误差	5
第二节 差分方程、截断误差和相容性	10
第三节 收敛性与稳定性	15
第四节 Lax 等价定理	21
第五节 基于差分的分析系统的组成	22
第三章 线性弹性力学问题的有限元法	25
第一节 弹性力学的基本方程	25
第二节 弹性力学平面问题的有限元列式	26
第三节 轴对称问题	47
第四节 三维问题	49
第五节 等参单元	54
第六节 加权余量法和变分法	59
第四章 弹塑性有限元法	64
第一节 概述	64
第二节 小变形弹塑性有限元法	65
第三节 大变形弹塑性有限元法	77
第五章 刚塑性有限元法	92
第一节 概述	92
第二节 刚(粘)塑性变分原理	93
第三节 刚塑性有限元求解的基本公式	102
第四节 热力耦合分析的有限元法	114
第六章 铸造过程的数值模拟	122
第一节 概述	122
第二节 铸件温度场数值模拟	122
第三节 铸件充型过程数值模拟	128
第七章 塑性成形过程的数值模拟	143

第一节	概述	143
第二节	有限元分析方法简介	143
第三节	冲压成形过程模拟方法	151
第四节	体积成形过程模拟方法	168
参考文献		195

第一章 绪 论

第一节 材料成形数值模拟概述

广义地说,材料加工是人类利用自然,创造有用产品的一种基本的生产活动,它将贯穿于人类的全部历史。狭义地说,本书讨论的材料加工主要是指现代金属材料的加工,即采用铸造、锻压等方法将金属原材料加工成所需的形状、尺寸,并达到一定的组织性能要求,这又称为材料成形。在现代制造业中,材料成形是生产各种零件或零件毛坯的主要方法。

材料成形的方法种类繁多,涉及到的物理、化学和力学现象十分复杂,是一个多学科交叉,融合的研究和应用领域。例如,在液态金属成形过程中,涉及液态金属的流动和包含了相变和结晶的凝固现象。在固态金属的塑性成形中,金属在发生大塑性变形的同时,也伴随着组织性能的变化,有时也涉及到相变和再结晶现象。

材料成形过程的基本规律可以用一组微分方程来描述,例如流动方程、热传导方程、平衡方程或运动方程等,这些方程在所讨论的问题中常常称为场方程或控制方程。在“材料成形原理”这门课程中,对这些方程进行了详细的阐述。为了分析一个具体的材料成形问题,除了要给出具有普遍意义的场方程以外,还要给出由该问题的特点所决定的定解条件,其中包括边值条件和初值条件。这样就把材料成形问题抽象为一个微分方程(组)的边值问题。一般说来,微分方程的边值问题只是在方程的性质比较简单、问题的求解域的几何形状十分规则的情况下,或是对问题进行充分简化的情况下,才能求得解析解。而实际的材料成形问题求解域往往是十分复杂的,而且场方程往往相互耦合,因此无法求得解析解,而在对问题进行过多简化后得到的近似解可能误差很大,甚至是错误的。

过去,由于缺乏科学的预测方法,材料成形工艺设计和模具设计的主要依据是设计人员在长期工作中积累的经验,以及由对简单模型的实验研究总结出的多种图表。对于复杂的零件,按照设计结果制造出工装模具以后,往往还需要通过反复的试验、修改,才能最终生产出合格的制品。这样,不但造成人力、物力、时间的巨大浪费,也难以保证产品质量。

近十几年来,随着计算机硬件、软件技术的飞速发展和对材料成形过程物理规律研究的深入,材料成形过程计算机模拟技术取得了很大的进展。计算机模拟

即是通过数值计算得到用微分方程边值问题来描述的具体材料成形问题中工件和模具的速度场（位移场）、应变场、应力场、温度场等，据此预测工件中组织性能的变化以及可能出现的缺陷；利用计算机图形技术将这些分析结果直观地、动态地呈现在研究设计人员面前，使他们能通过这个虚拟的材料加工过程检验工件的最终形状、尺寸、性能等是否符合设计要求，正确选用机器设备和模具材料。采用模拟技术，能在材料成形工艺设计和模具设计初步方案完成后立即对其进行检验，寻求可行的甚至最优的设计方案，然后再完成详细设计并进行模具制造。这样，在新产品开发时，就能使得产品设计、工装模具设计和制造等相关工作同时展开，即实现并行工程，达到降低成本、提高质量、缩短产品交货期的目的。

数值模拟方法的基本特点是将微分方程边值问题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：一类以有限元法为代表，另一类以有限差分法为代表。

有限差分法以差分代替微分，将求解对象在时间与空间上进行离散，对每个离散单元进行各种物理场分析（如温度场、流动场及应力场等），然后将所有单元的求解结果汇总，得到整个求解对象在不同时刻的行为变化，并对分析对象的可能变化（发展）趋势作出预测。有限差分法具有求解过程简单、速度快、前后置处理易于实现等优点。

有限元法的特点是将求解域离散为一组有限个形状简单且仅在节点处相互连接的单元的集合体，在每个单元内用一个满足一定要求的插值函数描述基本未知量在其中的分布，随着单元尺寸的缩小，近似的数值解将越来越逼近精确解。有限元法适应任意复杂的和变动的边界。

材料成形数值模拟是一门应用性很强的课程，应注重上机操作的实践性环节。有条件的读者应该采用模拟软件建模、求解、考察计算结果的合理性和准确性，从中了解模拟技术应用于工程实际问题的方法，掌握有关技术和技巧。建议配合本书教学的上机操作时间不少于 20 小时。

目前，在工业发达国家，材料成形计算机模拟技术越来越广泛地地各工业部门中得到应用，产生了明显的经济效益，正在深刻地改变着传统的产品设计、制造方式。在工业需求的推动下，国外已涌现出一批用于材料成形计算机模拟的商业软件，如用于金属板料成形分析的 DYNIFORM、PAM-STAMP、AutoForm 等，用于金属体积成形及热处理分析的 DEFORM 等。我国也研究开发了一些模拟软件，但在软件商品化，尤其是模拟技术的实际应用方面与工业发达国家相比还有

差距。材料成形计算机模拟技术有着巨大的发展前景。一方面,人们对于模拟的精度、速度和能力的期望是没有止境的;另一方面,随着各种新材料的发明和应用,必然会出现各种物理的、化学的甚至生物的材料成形新工艺,这将扩展材料成形计算机模拟的研究领域。随着计算机技术的发展和人们对材料成形基本规律,其中尤其是材料本构关系和边界条件研究的深入,模拟中将采用越来越精确的计算模型,更深刻地揭示材料的各种物理、力学性能和细观、微观组织性能与成形工艺的关系,以更短的计算时间得到更精确、更全面的模拟结果。

第二节 本书的编写和使用说明

本书的编写目的是介绍材料成形数值模拟的基本原理和方法,为读者在工作中正确地应用数值模拟技术解决工程问题打下较为坚实的基础。本书在编写中对内容进行了精选,力求突出如下特点:着重介绍数值计算的模型和求解方法,对前后置处理技术不作过多介绍;着重介绍与模拟技术的应用有关的概念和方法,对编程技术和算法不作过多介绍。我们认为这样处理能满足绝大多数读者的实际需要。需要自己编写模拟计算软件的读者,可以在学完本书后根据本书所列参考文献进一步深入研究。在本次修订中,我们对原书的某些错误进行了订正;同时对全书的编排进行了调整,将主要内容分为理论基础与实际应用两部分。

本书所必需的数学基础是高等数学和线性代数。读者最好先学过“材料成形原理”,若仅对书中某种模拟方法(例如弹性有限元法)感兴趣,则最好先具备有关的基本知识。但因为本书在编写中力求做到系统、完整,所以没有有关专业基础的读者也可学习。

本书的内容安排可以分为两部分:第二章到第五章介绍有限差分法和有限元法的基本理论和公式;第六章到第七章分别介绍计算机模拟技术在金属液态成形、塑性成形工艺设计和模具设计中的应用。

第二章主要讲述有限差分法的一些基本知识,包括:差分原理及逼近误差,差分方程、截断误差和相容性,收敛性与稳定性以及 Lax 等价定理等。

第三章介绍线弹性问题的有限元法,对单元分析、整体集成等有限元法的基本分析步骤进行了详细阐述,给出了具体计算公式,还介绍了几种用于平面问题和三维问题的常用单元模型,这一章的内容具有独立性,因此,仅想了解线弹性结构的强度、刚度分析的读者可仅学习本章。同时,本章也为第四、第五章的学习打下了必要的基础。本章最后将有限元法推广到求解一般微分方程的边值问题。

第四章将有限元法由线性分析推广到非线性分析。其中由于材料进入塑性变形而导致应力-应变关系出现的非线性称为材料非线性或物理非线性,由于材料

发生大变形和/或大转动而在位移（速度）与应变（应变速率）之间的关系中引入的非线性称为几何非线性。在金属塑性成形中这两类非线性往往同时出现。

第五章针对塑性变形量很大且不考虑卸载的问题，从 Markov 变分原理出发，介绍了刚塑性有限元法；针对某些条件下材料性能与应变速率相关的情况，介绍了粘塑性有限元法。第五章还介绍了热传导问题的有限元法。刚塑性和粘塑性有限元法作为简便高效的分析方法主要是应用于塑性成形模拟的。第四章和第五章的内容是相对独立的，读者可根据需要选学其一或二者都学。为了突出重点，节省篇幅，第四章和第五章主要采用矩阵式进行公式推导。

第六章介绍铸造过程的数值模拟技术，采用了有限差分法。本章介绍了温度场数值模拟的数学模型、离散及差分化、收敛性约束条件、潜热问题处理以及编程算法的实现等知识；还介绍了铸造领域的最新研究成果——铸件充型过程数值模拟技术，具体包括 N-S 方程、分离时间变量、方程的矢量形式、连续性方程、离散与差分化、SOLA-VOF 求解方法等内容，是有限差分法在实际领域的具体应用，充分体现了有限差分法在流动场数值模拟技术方面的优势。

第七章介绍塑性成形过程的数值模拟技术，采用了有限元法。本章首先介绍了有限元分析的基本步骤和塑性成形过程模拟的特点，然后针对冲压成形与体积成形这两类基本的塑性成形工艺问题给出了计算机模拟实例。

本书作者开发了若干教学软件，另外发行，可供读者选用。书末还列出了主要的参考文献目录，有志于深入钻研的读者可以从中找到进一步学习的资料。

第二章 有限差分法

有限差分法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作了一些基础性的工作。到了1910年，L. F. Richardson 在一篇论文中论述了 Laplace 方程、重调和方程等的迭代解法，为偏微分方程的数值分析奠定了基础。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。这些工作成了后来实际应用有限差分法的指南。20世纪40年代后半期出现了电子计算机，有限差分法得到迅速的发展，在很多领域（如传热分析、流动分析、扩散分析等）取得了显著的成就，对国民经济及人类生活产生了重要影响，积极地推动了社会的进步。

有限差分法在材料成形领域的应用较为普遍，与有限元法一起成为材料成形计算机模拟技术的主要两种数值分析方法。目前材料加工中的传热分析（如铸造成形过程的传热凝固、塑性成形中的传热、焊接成形中的热量传递等）、流动分析（如铸件充型过程，焊接熔池的产生、移动，激光熔覆中的动量传递等）都可以用有限差分方式进行模拟分析。特别是在流动场分析方面，与有限元相比，有限差分法有独特的优势，因此目前进行流体力学数值分析，绝大多数都是基于有限差分法。另外，一向被认为是有限差分法的弱项——应力分析，目前也取得了长足进步。一些基于差分法的材料加工领域的应力分析软件纷纷推出，从而使得流动、传热、应力统一于差分方式下。

可以预见，随着计算机技术的飞速发展，有限差分法将得到更为广泛的应用，可以为材料成形过程提供全面的、有效的指导。

本章主要讲述有限差分的一些基本知识，包括差分原理及逼近误差、差分方程、截断误差和相容性、收敛性与稳定性以及 L_{∞} 等价定理等，这些仅仅是有限差分的入门知识，为后续章节的学习奠定基础。

第一节 差分原理及逼近误差

一、差分原理

设有 x 的解析函数 $y = f(x)$ ，从微分学知道函数 y 对 x 的导数为

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



dy 、 dx 分别是函数及自变量的微分, $\frac{dy}{dx}$ 是函数对自变量的导数, 又称微商。相

应地, 上式中的 Δy 、 Δx 分别称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。

在导数的定义中, Δx 是以任意方式趋近于零的, 因而 Δx 可正可负。在差分方法中, Δx 总是取某一小的正数。这样一来, 与微分对应的差分可以有 3 种形式:

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

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

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

上面谈的是一阶导数, 对应的称为一阶差分。对一阶差分再作一阶差分, 所得到的称为二阶差分, 记为 $\Delta^2 y$ 。以向前差分为例, 有

$$\begin{aligned} \Delta^2 y &= \Delta(\Delta y) \\ &= \Delta[f(x + \Delta x) - f(x)] \\ &= \Delta f(x + \Delta x) - \Delta f(x) \\ &= [f(x + 2\Delta x) - f(x + \Delta x)] - [f(x + \Delta x) - f(x)] \\ &= f(x + 2\Delta x) - 2f(x + \Delta x) + f(x) \end{aligned} \quad (2-5)$$

依此类推, 任何阶差分都可由其低一阶的差分再作一阶差分得到。例如 n 阶向前差分为

$$\begin{aligned} \Delta^n y &= \Delta(\Delta^{n-1} y) \\ &= \Delta[\Delta(\Delta^{n-2} y)] \\ &\dots \\ &= \Delta\{\Delta \cdots [\Delta(\Delta y)]\} \\ &= \Delta\{\Delta \cdots [\Delta(f(x + \Delta x) - f(x))]\} \end{aligned} \quad (2-6)$$

n 阶的向后差分、中心差分的形式类似可以得到。

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。如一阶向前差商为

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (2-7)$$

一阶向后差商为

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

一阶中心差商为

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f\left(x + \frac{1}{2}\Delta x\right) - f\left(x - \frac{1}{2}\Delta x\right)}{\Delta x} \quad (2-9)$$

或

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (2-10)$$

二阶差商多取中心式, 即

$$\frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} \quad (2-11)$$

当然, 在某些情况下也可取向前或向后的二阶差商。

以上是一元函数的差分与差商。多元函数 $f(x, y, \dots)$ 的差分与差商也可以类推。如一阶向前差商为

$$\frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x, y, \dots) - f(x, y, \dots)}{\Delta x} \quad (2-12)$$

$$\frac{\Delta f}{\Delta y} = \frac{f(x, y + \Delta y, \dots) - f(x, y, \dots)}{\Delta y} \quad (2-13)$$

...

二、逼近误差

由导数(微商)和差商的定义知道, 当自变量的差分(增量)趋近于零时, 就可由差商得到导数, 因此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 Taylor 展开, 可以得到逼近误差相对于自变量差分(增量)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 Taylor 展开:

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) &= f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} f''(x) \\ &\quad + \frac{(\Delta x)^3}{3!} f'''(x) + \frac{(\Delta x)^4}{4!} f^{(4)}(x) + O((\Delta x)^5) \end{aligned} \quad (2-14)$$

$$\begin{aligned} \text{所以 } \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} &= f'(x) + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x \\ &\quad + \frac{f'''(x)}{3!} (\Delta x)^2 + \frac{f^{(4)}(x)}{4!} (\Delta x)^3 + O((\Delta x)^4) \\ &= f'(x) + O(\Delta x) \end{aligned} \quad (2-15)$$

这里符号 $O()$ 表示与 $()$ 中的量有相同量级的量。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。我们把 $O((\Delta x)^n)$ 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。由于 Δx 是个小量，因此阶数越大精度越高。

$$\begin{aligned} \text{又 } f(x-\Delta x) &= f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} f''(x) \\ &\quad - \frac{(\Delta x)^3}{3!} f'''(x) + \frac{(\Delta x)^4}{4!} f^{(4)}(x) + O((\Delta x)^5) \end{aligned} \quad (2-16)$$

$$\text{所以 } \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x} = f'(x) + O(\Delta x)$$

一阶向后差商也具有一阶精度。

将 $f(x+\Delta x)$ 与 $f(x-\Delta x)$ 的 Taylor 展开式相减可得

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} = f'(x) + O((\Delta x)^2) \quad (2-17)$$

可见一阶中心差商具有二阶精度。

将 $f(x+\Delta x)$ 与 $f(x-\Delta x)$ 的 Taylor 展开式相加可得

$$\frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} = f''(x) + O((\Delta x)^2) \quad (2-18)$$

这说明二阶中心差商的精度也为二阶。

在掌握了用 Taylor 展开分析差商精度的方法后，再来谈一谈函数差分 and 差商的定义。由于差分 and 差商是微分和导数的近似表达式，所以不必局限于前面的定义，而可予以扩充。设有函数 $f(x)$ ，自变量 x 的增量为 Δx ，若取

$$x = x_i + j\Delta x, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2-19)$$

对应的函数值为 $f(x_i + j\Delta x)$ ，则 $f(x)$ 在 x_i 处的 n 阶差分可表达为

$$\Delta^n f(x_i) = \sum_{j=-J_1}^{J_2} c_j f(x_i + j\Delta x) \quad (2-20)$$

$$c_j = \frac{n! a_j}{\sum_{j=-J_1}^{J_2} a_j j^n} \quad (2-21)$$

式中， c_j 为给定系数； J_1 和 J_2 是两个正整数。当 $J_1=0$ 时，称为向前差分；当 $J_2=0$ 时，称为向后差分；当 $J_1=J_2$ 且 $|c_j| = |c_{-j}|$ 时，称为中心差分。函数的 n 阶差分与自变量的 n 阶差分之比为 n 阶差商，可用 Taylor 展开分析其逼近误差 $O(\Delta x^m)$ 。显然， $m \leq 0$ 的差商及其对应的差分是不恰当的。当 a_j 为表 2-1 ~ 表 2-6 中所列的数值时，可得 $m > 0$ 。其中表 2-1 和表 2-2 的 $m=1$ ，即此二表对应差商的精度是一阶的；表 2-3 ~ 表 2-5 的 $m=2$ ，即这些表对应差商的精度是二阶的；

表 2-6 的 $m=4$ ，即此表对应差商的精度是四阶的。从这些表可以看出，一般地说，随着差分阶数的增大和对应差商精度的提高，差分表达式所包含的项数将增多。

表 2-1 不同条件下 a_j 的取值

n	j				
	0	1	2	3	4
	a_j				
1	-1	1			
2	1	-2	1		
3	-1	3	-3	1	
4	1	-4	6	-4	1

表 2-2 不同条件下 a_j 的取值

n	j				
	-4	-3	-2	-1	0
	a_j				
1				-1	1
2			1	-2	1
3		-1	3	-3	1
4	1	-4	6	-4	1

表 2-3 不同条件下 a_j 的取值

n	j					
	0	1	2	3	4	5
	a_j					
1	-3	4	-1			
2	2	-5	4	-1		
3	-5	18	-24	14	-3	
4	3	-14	26	-24	11	-2

表 2-4 不同条件下 a_j 的取值

n	j					
	-5	-4	-3	-2	-1	0
	a_j					
1				1	-4	3
2			-1	4	-5	2
3		3	-14	24	-18	5
4	-2	11	-24	26	-14	3

表 2-5 不同条件下 a_j 的取值

n	j				
	-2	-1	0	1	2
	a_j				
1		-1	0	1	
2		1	-2	1	
3	-1	2	0	-2	1
4	1	-4	6	-4	1

表 2-6 不同条件下 a_j 的取值

n	j						
	-3	-2	-1	0	1	2	3
	a_j						
1		1	-8	0	8	-1	
2		-1	16	-30	16	-1	
3	1	-8	13	0	-13	8	-1
4	-1	12	-39	56	-39	12	-1

以上的差分是用 $f(x_i \pm j\Delta x)$ 求得的，这表示是以等距离 Δx 向前、向后进行差分的。在有些情况下要求自变量的增量本身是变化的，如图 2-1 中的 Δx_{i-2} 、 Δx_{i-1} 、 Δx_i 和 Δx_{i+1} ，是不相等的，相应的差分 and 差商就是不等距的。

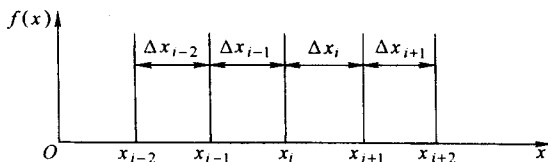


图 2-1 变距离差分

下面列出一些不等距的差商：

$$\text{一阶向后差商} \quad \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x_{i-1})}{\Delta x_{i-1}} \quad (2-22)$$

$$\text{一阶中心差商} \quad \frac{f(x_i + \Delta x_i) - f(x_i - \Delta x_{i-1})}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \quad (2-23)$$

$$\text{二阶向后差商} \quad \frac{2[f(x_i)\Delta x_{i-2} - f(x_i - \Delta x_{i-1})(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1}) + f(x_i - \Delta x_{i-1} - \Delta x_{i-2})\Delta x_{i-1}]}{\Delta x_{i-2}\Delta x_{i-1}(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1})} \quad (2-24)$$

$$\text{二阶中心差商} \quad \frac{2[f(x_i + \Delta x_i)\Delta x_{i-1} - f(x_i)(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i) + f(x_i - \Delta x_{i-1})\Delta x_i]}{\Delta x_{i-1}\Delta x_i(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \quad (2-25)$$

以上都是一阶精度的。二阶精度的差商如下：

$$\text{一阶向后差商} \quad \frac{f(x_i)[(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1})^2 - \Delta x_{i-1}^2] - f(x_i - \Delta x_{i-1})(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1})^2 + f(x_i - \Delta x_{i-1} - \Delta x_{i-2})\Delta x_{i-1}^2}{\Delta x_{i-2}\Delta x_{i-1}(\Delta x_{i-2} + \Delta x_{i-1})} \quad (2-26)$$

$$\text{一阶中心差商} \quad \frac{f(x_i + \Delta x_i)\Delta x_{i-1}^2 + f(x_i)(\Delta x_{i-1}^2 - \Delta x_i^2) - f(x_i - \Delta x_{i-1})\Delta x_i^2}{\Delta x_{i-1}\Delta x_i(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)} \quad (2-27)$$

基于不等距离（一维）、不等规格（二维、三维）网格的有限差分法已广泛应用于目前的商品化软件中，一般称为变网格技术。变网格技术可以在保证计算精度的前提下有效地提高计算速度。

第二节 差分方程、截断误差和相容性

如前所述，差分相应于微分，差商相应于导数。只不过差分和差商是用有限