

第二十章 偏微分方程的数值解

自然科学与工程技术中种种运动发展过程与平衡现象各自遵守一定的规律。这些规律的定量表述一般地呈现为关于含有未知函数及其导数的方程。我们将只含有未知多元函数及其偏导数的方程，称之为偏微分方程。

方程中出现的未知函数偏导数的最高阶数称为偏微分方程的阶。如果方程中对于未知函数和它的所有偏导数都是线性的，这样的方程称为线性偏微分方程，否则称它为非线性偏微分方程。

初始条件和边界条件称为定解条件，未附加定解条件的偏微分方程称为泛定方程。对于一个具体的问题，定解条件与泛定方程总是同时提出。定解条件与泛定方程作为一个整体，称为定解问题。

§1 偏微分方程的定解问题

各种物理性质的定常（即不随时间变化）过程，都可用椭圆型方程来描述。其最典型、最简单的形式是泊松(Poisson)方程

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) \quad (1)$$

特别地，当 $f(x, y) \equiv 0$ 时，即为拉普拉斯(Laplace)方程，又称为调和方程

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (2)$$

带有稳定热源或内部无热源的稳定温度场的温度分布，不可压缩流体的稳定无旋流动及静电场的电势等均满足这类方程。

Poisson 方程的第一边值问题为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) & (x, y) \in \Omega \\ u(x, y)|_{(x, y) \in \Gamma} = \varphi(x, y) & \Gamma = \partial\Omega \end{cases} \quad (3)$$

其中 Ω 为以 Γ 为边界的有界区域， Γ 为分段光滑曲线， $\Omega \cup \Gamma$ 称为定解区域， $f(x, y), \varphi(x, y)$ 分别为 Ω, Γ 上的已知连续函数。

第二类和第三类边界条件可统一表示成

$$\left(\frac{\partial u}{\partial n} + \alpha u \right) \Big|_{(x, y) \in \Gamma} = \varphi(x, y) \quad (4)$$

其中 n 为边界 Γ 的外法线方向。当 $\alpha = 0$ 时为第二类边界条件， $\alpha \neq 0$ 时为第三类边界条件。

在研究热传导过程，气体扩散现象及电磁场的传播等随时间变化的非定常物理问题时，常常会遇到抛物型方程。其最简单的形式为一维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (a > 0) \quad (5)$$

方程 (5) 可以有两种不同类型的定解问题：

初值问题（也称为 Cauchy 问题）

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & t > 0, \quad -\infty < x < +\infty \\ u(x, 0) = \varphi(x) & -\infty < x < +\infty \end{cases} \quad (6)$$

初边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & 0 < t < T, \quad 0 < x < l \\ u(x, 0) = \varphi(x) \\ u(0, t) = g_1(t), u(l, t) = g_2(t), \quad 0 \leq t \leq T \end{cases} \quad (7)$$

其中 $\varphi(x), g_1(t), g_2(t)$ 为已知函数, 且满足连接条件

$$\varphi(0) = g_1(0), \quad \varphi(l) = g_2(0)$$

问题 (7) 中的边界条件 $u(0, t) = g_1(t), u(l, t) = g_2(t)$ 称为第一类边界条件。第二类和第三类边界条件为

$$\begin{cases} \left[\frac{\partial u}{\partial x} - \lambda_1(t)u \right]_{x=0} = g_1(t), \quad 0 \leq t \leq T \\ \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \lambda_2(t)u \right]_{x=l} = g_2(t), \quad 0 \leq t \leq T \end{cases} \quad (8)$$

其中 $\lambda_1(t) \geq 0, \lambda_2(t) \geq 0$ 。当 $\lambda_1(t) = \lambda_2(t) \equiv 0$ 时, 为第二类边界条件, 否则称为第三类边界条件。

双曲型方程的最简单形式为一阶双曲型方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

物理中常见的一维振动与波动问题可用二阶波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (10)$$

描述, 它是双曲型方程的典型形式。方程 (10) 的初值问题为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & t > 0, \quad -\infty < x < +\infty \\ u(x, 0) = \varphi(x) & -\infty < x < +\infty \\ \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = \phi(x) & -\infty < x < +\infty \end{cases} \quad (11)$$

边界条件一般也有三类, 最简单的初边值问题为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & t > 0, 0 < x < l \\ u(x, 0) = \varphi(x), \quad \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{t=0} = \phi(x) & 0 \leq x \leq l \\ u(0, t) = g_1(t), \quad u(l, t) = g_2(t) & 0 \leq t \leq T \end{cases}$$

如果偏微分方程定解问题的解存在, 唯一且连续依赖于定解数据 (即出现在方程和定解条件中的已知函数), 则此定解问题是适定的。可以证明, 上面所举各种定解问题都是适定的。

§2 偏微分方程的差分解法

差分方法又称为有限差分方法或网格法, 是求偏微分方程定解问题的数值解中应用最广泛的方法之一。它的基本思想是: 先对求解区域作网格剖分, 将自变量的连续变化区域用有限离散点 (网格点) 集代替; 将问题中出现的连续变量的函数用定义在网格点上离散变量的函数代替; 通过用网格点上函数的差商代替导数, 将含连续变量的偏微分方程定解问题化成只含有限个未知数的代数方程组 (称为差分格式)。如果差分格式有解, 且当网格无限变小时其解收敛于原微分方程定解问题的解, 则差分格式的解就作为原问题的近似解 (数值解)。因此, 用差分方法求偏微分方程定解问题一般需要解决以下问题:

- (i) 选取网格;
- (ii) 对微分方程及定解条件选择差分近似, 列出差分格式;
- (iii) 求解差分格式;
- (iv) 讨论差分格式解对于微分方程解的收敛性及误差估计。

下面我们只对偏微分方程的差分解法作一简要的介绍。

2.1 椭圆型方程第一边值问题的差分解法

以 Poisson 方程 (1) 为基本模型讨论第一边值问题的差分方法。

考虑 Poisson 方程的第一边值问题 (3)

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) & (x, y) \in \Omega \\ u(x, y)|_{(x, y) \in \Gamma} = \varphi(x, y) & \Gamma = \partial\Omega \end{cases}$$

取 h, τ 分别为 x 方向和 y 方向的步长, 以两族平行线 $x = x_k = kh, y = y_j = j\tau$ ($k, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) 将定解区域剖分成矩形网格。节点的全体记为 $R = \{(x_k, y_j) | x_k = kh, y_j = j\tau, i, j \text{ 为整数}\}$ 。定解区域内部的节点称为内点, 记内点集 $R \cap \Omega$ 为 $\Omega_{h\tau}$ 。边界 Γ 与网格线的交点称为边界点, 边界点全体记为 $\Gamma_{h\tau}$ 。与节点 (x_k, y_j) 沿 x 方向或 y 方向只差一个步长的点 $(x_{k\pm 1}, y_j)$ 和 $(x_k, y_{j\pm 1})$ 称为节点 (x_k, y_j) 的相邻节点。如果一个内点的四个相邻节点均属于 $\Omega \cup \Gamma$, 称为正则内点, 正则内点的全体记为 $\Omega^{(1)}$, 至少有一个相邻节点不属于 $\Omega \cup \Gamma$ 的内点称为非正则内点, 非正则内点的全体记为 $\Omega^{(2)}$ 。我们的问题是要求出问题 (3) 在全体内点上的数值解。

为简便记, 记 $(k, j) = (x_k, y_j), u(k, j) = u(x_k, y_j), f_{k,j} = f(x_k, y_j)$ 。对正则内点

$(k, j) \in \Omega^{(1)}$, 由二阶中心差商公式

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{(k,j)} &= \frac{u(k+1, j) - 2u(k, j) + u(k-1, j)}{h^2} + O(h^2) \\ \left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{(k,j)} &= \frac{u(k, j+1) - 2u(k, j) + u(k, j-1)}{\tau^2} + O(\tau^2)\end{aligned}$$

Poisson 方程 (1) 在点 (k, j) 处可表示为

$$\begin{aligned}& \frac{u(k+1, j) - 2u(k, j) + u(k-1, j)}{h^2} + \frac{u(k, j+1) - 2u(k, j) + u(k, j-1)}{\tau^2} \\ &= f_{k,j} + O(h^2 + \tau^2)\end{aligned}\quad (12)$$

在式 (12) 中略去 $O(h^2 + \tau^2)$, 即得与方程 (1) 相近似的差分方程

$$\frac{u_{k+1,j} - 2u_{k,j} + u_{k-1,j}}{h^2} + \frac{u_{k,j+1} - 2u_{k,j} + u_{k,j-1}}{\tau^2} = f_{k,j}\quad (13)$$

式 (13) 中方程的个数等于正则内点的个数, 而未知数 $u_{k,j}$ 则除了包含正则内点处解 u 的近似值, 还包含一些非正则内点处 u 的近似值, 因而方程个数少于未知数个数。在非正则内点处 Poisson 方程的差分近似不能按式 (13) 给出, 需要利用边界条件得到。边界条件的处理可以有各种方案, 下面介绍较简单的两种。

(i) 直接转移

(ii) 线性插值

由式 (13) 所给出的差分格式称为五点菱形格式, 实际计算时经常取 $h = \tau$, 此时五点菱形格式可化为

$$\frac{1}{h^2}(u_{k+1,j} + u_{k-1,j} + u_{k,j+1} + u_{k,j-1} - 4u_{k,j}) = f_{k,j}\quad (14)$$

简记为

$$\frac{1}{h^2} \diamond u_{k,j} = f_{k,j}\quad (15)$$

其中 $\diamond u_{k,j} = u_{k+1,j} + u_{k-1,j} + u_{k,j+1} + u_{k,j-1} - 4u_{k,j}$ 。

求解差分方程组最常用的方法是同步迭代法, 同步迭代法是最简单的迭代方式。除边界节点外, 区域内节点的初始值是任意取定的。

例 1 用五点菱形格式求解 Laplace 方程第一边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 & (x, y) \in \Omega \\ u(x, y)|_{(x,y) \in \Gamma} = \lg[(1+x)^2 + y^2] & \Gamma = \partial\Omega \end{cases}$$

其中 $\Omega = \{(x, y) | 0 \leq x, y \leq 1\}$ 。取 $h = \tau = \frac{1}{3}$ 。

当 $h = \tau$ 时, 利用点 $(k, j), (k \pm 1, j-1), (k \pm 1, j+1)$ 构造的差分格式

$$\frac{1}{2h^2}(u_{k+1,j+1} + u_{k+1,j-1} + u_{k-1,j+1} + u_{k-1,j-1} - 4u_{k,j}) = f_{k,j}\quad (16)$$

称为五点矩形格式，简记为

$$\frac{1}{2h^2} \mathfrak{I} u_{k,j} = f_{k,j} \quad (17)$$

其中 $\mathfrak{I} u_{k,j} = u_{k+1,j+1} + u_{k+1,j-1} + u_{k-1,j+1} + u_{k-1,j-1} - 4u_{k,j}$ 。

2.2 抛物型方程的差分解法

以一维热传导方程 (5)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (a > 0)$$

为基本模型讨论适用于抛物型方程定解问题的几种差分格式。

首先对 xt 平面进行网格剖分。分别取 h, τ 为 x 方向与 t 方向的步长，用两族平行直线 $x = x_k = kh (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ ， $t = t_j = j\tau (j = 0, 1, 2, \dots)$ ，将 xt 平面剖分成矩形网格，节点为 $(x_k, t_j) (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, j = 0, 1, 2, \dots)$ 。为简便起见，记 $(k, j) = (x_k, y_j)$ ， $u(k, j) = u(x_k, y_j)$ ， $\varphi_k = \varphi(x_k)$ ， $g_{1j} = g_1(t_j)$ ， $g_{2j} = g_2(t_j)$ ， $\lambda_{1j} = \lambda_1(t_j)$ ， $\lambda_{2j} = \lambda_2(t_j)$ 。

2.2.1 微分方程的差分近似

在网格内点 (k, j) 处，对 $\frac{\partial u}{\partial t}$ 分别采用向前、向后及中心差商公式，对 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 采用二阶中心差商公式，一维热传导方程 (5) 可分别表示为

$$\frac{u(k, j+1) - u(k, j)}{\tau} - a \frac{u(k+1, j) - 2u(k, j) + u(k-1, j)}{h^2} = O(\tau + h^2)$$

$$\frac{u(k, j) - u(k, j-1)}{\tau} - a \frac{u(k+1, j) - 2u(k, j) + u(k-1, j)}{h^2} = O(\tau + h^2)$$

$$\frac{u(k, j+1) - u(k, j-1)}{2\tau} - a \frac{u(k+1, j) - 2u(k, j) + u(k-1, j)}{h^2} = O(\tau + h^2)$$

由此得到一维热传导方程的不同的差分近似

$$\frac{u_{k,j+1} - u_{k,j}}{\tau} - a \frac{u_{k+1,j} - 2u_{k,j} + u_{k-1,j}}{h^2} = 0 \quad (18)$$

$$\frac{u_{k,j} - u_{k,j-1}}{\tau} - a \frac{u_{k+1,j} - 2u_{k,j} + u_{k-1,j}}{h^2} = 0 \quad (19)$$

$$\frac{u_{k,j+1} - u_{k,j-1}}{2\tau} - a \frac{u_{k+1,j} - 2u_{k,j} + u_{k-1,j}}{h^2} = 0 \quad (20)$$

2.2.2 初、边值条件的处理

为用差分方程求解定解问题 (6)，(7) 等，还需对定解条件进行离散化。

对初始条件及第一类边界条件，可直接得到

$$u_{k,0} = u(x_k, 0) = \varphi_k \quad (k = 0, \pm 1, \dots \text{或} k = 0, 1, \dots, n) \quad (21)$$

$$u_{0,j} = u(0, t_j) = g_{1j} \quad (j = 0, 1, \dots, m-1) \quad (22)$$

$$u_{n,j} = u(l, t_j) = g_{2j}$$

其中 $n = \frac{l}{h}, m = \frac{T}{\tau}$ 。

对第二、三类边界条件则需用差商近似。下面介绍两种较简单的处理方法。

(i) 在左边界 ($x=0$) 处用向前差商近似偏导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ ，在右边界 ($x=l$) 处用向后差

商近似偏导数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ ，即

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(0,j)} &= \frac{u(1,j) - u(0,j)}{h} + O(h) \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(n,j)} &= \frac{u(n,j) - u(n-1,j)}{h} + O(h)\end{aligned}\quad (j=0,1,\dots,m)$$

即得边界条件 (8) 的差分近似为

$$\begin{cases} \frac{u_{1,j} - u_{0,j}}{h} - \lambda_{1j} u_{0,j} = g_{1j} \\ \frac{u_{n,j} - u_{n-1,j}}{h} + \lambda_{2j} u_{n,j} = g_{2j} \end{cases} \quad (j=0,1,\dots,m) \quad (23)$$

(ii) 用中心差商近似 $\frac{\partial u}{\partial x}$ ，即

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(0,j)} &= \frac{u(1,j) - u(-1,j)}{2h} + O(h^2) \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(n,j)} &= \frac{u(n+1,j) - u(n-1,j)}{2h} + O(h^2)\end{aligned}\quad (j=0,1,\dots,m)$$

则得边界条件的差分近似为

$$\begin{cases} \frac{u_{1,j} - u_{-1,j}}{2h} - \lambda_{1j} u_{0,j} = g_{1j} \\ \frac{u_{n+1,j} - u_{n-1,j}}{2h} + \lambda_{2j} u_{n,j} = g_{2j} \end{cases} \quad (j=0,1,\dots,m) \quad (24)$$

这样处理边界条件，误差的阶数提高了，但式 (24) 中出现定解区域外的节点 $(-1, j)$ 和 $(n+1, j)$ ，这就需要将解拓展到定解区域外。可以通过用内节点上的 u 值插值求出 $u_{-1,j}$ 和 $u_{n+1,j}$ ，也可以假定热传导方程 (5) 在边界上也成立，将差分方程扩展到边界节点上，由此消去 $u_{-1,j}$ 和 $u_{n+1,j}$ 。

2.2.3 几种常用的差分格式

下面我们以热传导方程的初边值问题 (7) 为例给出几种常用的差分格式。

(i) 古典显式格式

为便于计算，令 $r = \frac{a\tau}{h^2}$ ，式 (18) 改写成以下形式

$$u_{k,j+1} = ru_{k+1,j} + (1-2r)u_{k,j} + ru_{k-1,j}$$

将式 (18) 与 (21), (22) 结合, 我们得到求解问题 (7) 的一种差分格式

$$\begin{cases} u_{k,j+1} = ru_{k+1,j} + (1-2r)u_{k,j} + ru_{k-1,j} & (k=1,2,\dots,n-1, j=0,1,\dots,m-1) \\ u_{k,0} = \varphi_k & (k=1,2,\dots,n) \\ u_{0,j} = g_{1j}, \quad u_{n,j} = g_{2j} & (j=1,2,\dots,m) \end{cases} \quad (25)$$

由于第 0 层 ($j=0$) 上节点处的 u 值已知 ($u_{k,0} = \varphi_k$), 由式 (25) 即可算出 u 在第一层 ($j=1$) 上节点处的近似值 $u_{k,1}$ 。重复使用式 (25), 可以逐层计算出各层节点的近似值。

(ii) 古典隐式格式

将 (19) 整理并与式 (21), (22) 联立, 得差分格式如下

$$\begin{cases} u_{k,j+1} = u_{k,j} + r(u_{k+1,j+1} - 2u_{k,j+1} + u_{k-1,j+1}) & (k=1,2,\dots,n-1, j=0,1,\dots,m-1) \\ u_{k,0} = \varphi_k & (k=0,1,\dots,n) \\ u_{0,j} = g_{1j}, \quad u_{n,j} = g_{2j} & (j=0,1,\dots,m) \end{cases} \quad (26)$$

其中 $r = \frac{a\tau}{h^2}$ 。虽然第 0 层上的 u 值仍为已知, 但不能由式 (30) 直接计算以上各层节点上的值 $u_{k,j}$, 故差分格式 (26) 称为古典隐式格式。

(iii) 杜福特—弗兰克尔 (DoFort—Frankel) 格式

DoFort—Frankel 格式是三层显式格式, 它是由式 (24) 与 (25), (26) 结合得到的。具体形式如下:

$$\begin{cases} u_{k,j+1} = \frac{2r}{1+2r}(u_{k+1,j} + u_{k-1,j}) + \frac{1-2r}{1+2r}u_{k,j-1} & (k=1,2,\dots,n-1, j=1,2,\dots,m-1) \\ u_{k,0} = \varphi_k & (k=0,1,\dots,n) \\ u_{0,j} = g_{1j}, \quad u_{n,j} = g_{2j} & (j=0,1,\dots,m) \end{cases} \quad (27)$$

用这种格式求解时, 除了第 0 层上的值 $u_{k,0}$ 由初值条件 (21) 得到, 必须先用二层格式求出第 1 层上的值 $u_{k,1}$, 然后再按格式 (27) 逐层计算 $u_{k,j}$ ($j=2,3,\dots,m$)。

2.3 双曲型方程的差分解法

对二阶波动方程 (10)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

如果令 $v_1 = \frac{\partial u}{\partial t}$, $v_2 = \frac{\partial u}{\partial x}$, 则方程 (10) 可化成一阶线性双曲型方程组

$$\begin{cases} \frac{\partial v_1}{\partial t} = a^2 \frac{\partial v_2}{\partial x} \\ \frac{\partial v_2}{\partial t} = \frac{\partial v_1}{\partial x} \end{cases} \quad (28)$$

记 $v = (v_1, v_2)^T$, 则方程组 (28) 可表成矩阵形式

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \begin{bmatrix} 0 & a^2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\partial v}{\partial x} = A \frac{\partial v}{\partial x} \quad (29)$$

矩阵 A 有两个不同的特征值 $\lambda = \pm a$ ，故存在非奇异矩阵 P ，使得

$$PAP^{-1} = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & -a \end{bmatrix} = \Lambda$$

作变换 $w = Pv = (w_1, w_2)^T$ ，方程组 (29) 可化成

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \Lambda \frac{\partial w}{\partial x} \quad (30)$$

方程组 (30) 由两个独立的一阶双曲型方程联立而成。因此下面主要讨论一阶双曲型方程的差分解法。

考虑一阶双曲型方程的初值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 & t > 0 \quad -\infty < x < +\infty \\ u(x, 0) = \varphi(x) & -\infty < x < +\infty \end{cases} \quad (31)$$

与抛物型方程的讨论类似，仍将 xt 平面剖分成矩形网格。取 x 方向步长为 h ， t 方向步长为 τ ，网格线为 $x = x_k = kh (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ ， $t = t_j = j\tau (j = 0, 1, 2, \dots)$ 。为简便起见，记 $(k, j) = (x_k, y_j)$ ， $u(k, j) = u(x_k, y_j)$ ， $\varphi_k = \varphi(x_k)$ 。

以不同的差商近似偏导数，可以得到方程 (9) 的不同的差分近似

$$\frac{u_{k,j+1} - u_{k,j}}{\tau} + a \frac{u_{k+1,j} - u_{k,j}}{h} = 0 \quad (32)$$

$$\frac{u_{k,j+1} - u_{k,j}}{\tau} - a \frac{u_{k,j} - u_{k-1,j}}{h} = 0 \quad (33)$$

$$\frac{u_{k,j+1} - u_{k,j}}{\tau} - a \frac{u_{k+1,j} - u_{k-1,j}}{2h} = 0 \quad (34)$$

结合离散化的初始条件，可以得到几种简单的差分格式。

§ 3 一维状态空间的偏微分方程的 MATLAB 解法

3.1 工具箱命令介绍

MATLAB 提供了一个指令 `pdepe`，用以解以下的 PDE 方程式

$$c(x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x}) \frac{\partial u}{\partial t} = x^{-m} \frac{\partial}{\partial x} (x^m f(x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x})) + s(x, t, u, \frac{\partial u}{\partial x}) \quad (35)$$

其中时间介于 $t_0 \leq t \leq t_f$ 之间，而位置 x 则介于 $[a, b]$ 有限区域之间。 m 值表示问题的对称性，其可为 0, 1 或 2，分别表示平板(slab)，圆柱(cylindrical)或球体(spherical)的情形。因而，如果 $m > 0$ ，则 a 必等于 b ，也就是说其具有圆柱或球体的对称关系。同时，式中 $f(x, t, u, \partial u / \partial x)$ 一项为流量(flux)，而 $s(x, t, u, \partial u / \partial x)$ 为来源(source)项。

$c(x, t, u, \partial u / \partial x)$ 为偏微分方程的对角线系数矩阵。若某一对角线元素为 0，则表示该偏微分方程为椭圆型偏微分方程，若为正值(不为 0)，则为抛物型偏微分方程。请注意 c 的对角线元素一定不全为 0。偏微分方程初始值可表示为

$$u(x, t_0) = v_0(x) \quad (36)$$

而边界条件为

$$p(x, t, u) + q(x, t) f(x, t, u, \partial u / \partial x) = 0 \quad (37)$$

其中 x 为两端点位置, 即 a 或 b

用以解含上述初始值及边界值条件的偏微分方程的 MATLAB 命令 `pdepe` 的用法如下:

$$sol = pdepe(m, pdepe, icfun, bcfun, xmesh, tspan, options)$$

其中

m 为问题之对称参数;

$xmesh$ 为空间变量 x 的网格点(mesh)位置向量, 即 $xmesh = [x_0, x_1, \dots, x_N]$, 其中 $x_0 = a$ (起点), $x_N = b$ (终点)。

$tspan$ 为时间变量 t 的向量, 即 $tspan = [t_0, t_1, \dots, t_M]$, 其中 t_0 为起始时间, t_M 为终点时间。

$pdefun$ 为使用者提供的 `pde` 函数文件。其函数格式如下:

$$[c, f, s] = pdefun(x, t, u, dudx)$$

亦即, 使用者仅提供偏微分方程中的系数向量。 c , f 和 s 均为行(column)向量, 而向量 c 即为矩阵 c 的对角线元素。

$icfun$ 提供解 u 的起始值, 其格式为 $u = icfun(x)$ 值得注意的是 u 为行向量。

$bcfun$ 使用者提供的边界条件函数, 格式如下:

$$[pl, ql, pr, qr] = bcfun(xl, ul, xr, ur, t)$$

其中 ul 和 ur 分别表示左边界 ($xl = b$) 和右边界 ($xr = a$) u 的近似解。输出变量中, pl 和 ql 分别表示左边界 p 和 q 的行向量, 而 pr 和 qr 则为右边界 p 和 q 的行向量。

sol 为解答输出。 sol 为多维的输出向量, $sol(:, i)$ 为 u_i 的输出, 即 $u_i = sol(:, i)$ 。

元素 $u_i(j, k) = sol(j, k, i)$ 表示在 $t = tspan(j)$ 和 $x = xmesh(k)$ 时 u_i 之答案。

$options$ 为求解器的相关解法参数。详细说明参见 `odeset` 的使用方法。

注:

1. MATLAB PDE 求解器 `pdepe` 的算法, 主要是将原来的椭圆型和抛物线型偏微分方程转化为一组常微分方程。此转换的过程是基于使用者所指定的 `mesh` 点, 以二阶空间离散化(spatial discretization)技术为之(Keel and Berzins, 1990), 然后以 `ode15s` 的指令求解。采用 `ode15s` 的 `ode` 解法, 主要是因为离散化的过程中, 椭圆型偏微分方程被转化为一组代数方程, 而抛物线型的偏微分方程则被转化为一组联立的微分方程。因而, 原偏微分方程被离散化后, 变成一组同时伴有微分方程与代数方程的微分代数方程组, 故以 `ode15s` 便可顺利求解。

2. x 的取点(mesh)位置对解的精确度影响很大, 若 `pdepe` 求解器给出 “...has difficulty finding consistent initial condition” 的讯息时, 使用者可进一步将 `mesh` 点取密一点, 即增加 `mesh` 点数。另外, 若状态 u 在某些特定点上较快速的变动时, 亦需将此处的点取密集些, 以增加精确度。值得注意的是 `pdepe` 并不会自动做 `xmesh` 的自动取点, 使用者必须观察解的特性, 自行作取点的操作。一般而言, 所取的点数至少需大于 3 以上。

3. `tspan` 的选取主要是基于使用者对那些特定时间的状态有兴趣而选定。而间距

(step size)的控制由程序自动完成。

4. 若要获得特定位置及时间下的解，可配合以 `pdeval` 命令。使用格式如下：

$$[uout, duoutdx] = pdeval(m, xmesh, ui, xout)$$

其中

m 代表问题的对称性。 $m=0$ 表示平板； $m=1$ 表示圆柱体； $m=2$ 表示球体。其意义同 `pdepe` 中的自变量 m 。

$xmesh$ 为使用者在 `pdepe` 中所指定的输出点位置向量。 $xmesh = [x_0, x_1, \dots, x_N]$ 。

ui 即 `sol(j, :, i)`。也就是说其为 `pdepe` 输出中第 i 个输出 ui 在各点位置 $xmesh$ 处，时间固定为 $t_j = tspan(j)$ 下的解。

$xout$ 为所欲内插输出点位置向量。此为使用者重新指定的位置向量。

$uout$ 为基于所指定位置 $xout$ ，固定时间 t_f 下的相对应输出。

$duoutdx$ 为相对应的 du/dx 输出值。

ref. Keel, R.D. and M. Berzins, "A Method for the Spatial Discretization of Parabolic Equations in One Space Variable", SIAM J. Sci. and Stat. Comput., Vol.11, pp.1-32, 1990.

以下将以数个例子，详细说明 `pdepe` 的用法。

3.2 求解一维偏微分方程

例 2 试解以下之偏微分方程式

$$\pi^2 \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

其中 $0 \leq x \leq 1$ ，且满足以下之条件限制式

(i) 起始值条件

$$IC: u(x, 0) = \sin(\pi x)$$

(ii) 边界条件

$$BC1: u(0, t) = 0$$

$$BC2: \pi e^{-t} + \frac{\partial u(1, t)}{\partial x} = 0$$

注：本问题的解析解为 $u(x, t) = e^{-t} \sin(\pi x)$

解 下面将叙述求解的步骤与过程。当完成以下各步骤后，可进一步将其汇总为主程序 `ex20_1.m`，然后求解。

步骤 1 将欲求解的偏微分方程改写成如式的标准式。

$$\pi^2 \frac{\partial u}{\partial t} = x^0 \frac{\partial}{\partial x} \left(x^0 \frac{\partial u}{\partial x} \right) + 0$$

此即

$$\begin{aligned} c(x, t, u, \partial u / \partial x) &= \pi^2 \\ f(x, t, u, \partial u / \partial x) &= \frac{\partial u}{\partial x} \\ s(x, t, u, \partial u / \partial x) &= 0 \end{aligned}$$

和 $m = 0$ 。

步骤 2 编写偏微分方程的系数向量函数。

`function [c, f, s] = ex20_1pdefun(x, t, u, dudx)`

```
c=pi^2;
f=dudx;
s=0;
```

步骤3 编写起始值条件。

```
function u0=ex20_lic(x)
u0=sin(pi*x);
```

步骤4 编写边界条件。在编写之前，先将边界条件改写成标准形式，如式(37)，找出相对应的 $p(\cdot)$ 和 $q(\cdot)$ 函数，然后写出 MATLAB 的边界条件函数，例如，原边界条件可写成

$$\text{BC1: } u(0,t) + 0 \cdot \frac{\partial}{\partial x}(0,t) = 0, \quad x = 0$$

$$\text{BC2: } \pi e^{-t} + 1 \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(1,t) = 0, \quad x = 1$$

即

$$pl = u(0,t), \quad ql = 0,$$

和

$$pr = \pi e^{-t}, \quad qr = 1$$

因而，边界条件函数可编写成

```
function [pl,ql,pr,qr]=ex20_lbc(xl,ul,xr,ur,t)
pl=ul;
ql=0;
pr=pi*exp(-t);
qr=1;
```

步骤5 取点。例如

```
x=linspace(0,1,20); %x 取 20 点
t=linspace(0,2,5); %时间取 5 点输出
```

步骤6 利用 pdepe 求解。

```
m=0; %依步骤1之结果
sol=pdepe(m,@ex20_1pdefun,@ex20_lic,@ex20_lbc,x,t);
```

步骤7 显示结果。

```
u=sol(:,:,1);
surf(x,t,u)
title('pde 数值解')
xlabel('位置')
ylabel('时间')
zlabel('u')
```

若要显示特定点上的解，可进一步指定 x 或 t 的位置，以便绘图。例如，欲了解时间为 2(终点)时，各位置下的解，可输入以下指令(利用 pdeval 指令)：

```
figure(2); %绘成图 2
M=length(t); %取终点时间的下标
xout=linspace(0,1,100); %输出点位置
[uout,dudx]=pdeval(m,x,u(M,:),xout);
plot(xout,uout); %绘图
title('时间为 2 时,各位置下的解')
xlabel('x')
ylabel('u')
```

综合以上各步骤，可写成一个程序求解例 2。其参考程序如下：

```
function ex20_1
%*****
%求解一维热传导偏微分方程的一个综合函数程序
%*****
m=0;
x=linspace(0,1,20); %xmesh
t=linspace(0,2,20); %tspan
%*****
%以 pde 求解
%*****
sol=pdepe(m,@ex20_1pdefun,@ex20_1ic,@ex20_1bc,x,t);
u=sol(:, :, 1); %取出答案
%*****
%绘图输出
%*****
figure(1)
surf(x,t,u)
title('pde 数值解')
xlabel('位置 x')
ylabel('时间 t')
zlabel('数值解 u')
%*****
%与解析解做比较
%*****
figure(2)
surf(x,t,exp(-t)*sin(pi*x));
title('解析解')
xlabel('位置 x')
ylabel('时间 t')
zlabel('数值解 u')
%*****
%t=tf=2 时各位置之解
%*****
figure(3)
M=length(t); %取终点时间的下表
xout=linspace(0,1,100); %输出点位置
[uout,dudx]=pdeval(m,x,u(M,:),xout);
plot(xout,uout); %绘图
title('时间为 2 时,各位置下的解')
xlabel('x')
ylabel('u')
%*****
%pde 函数
%*****
function [c,f,s]=ex20_1pdefun(x,t,u,dudx)
c=pi^2;
f=dudx;
s=0;
%*****
```

```

%初始条件函数
%*****
function u0=ex20_1ic(x)
u0=sin(pi*x);
%*****
%边界条件函数
%*****
function [pl,ql,pr,qr]=ex20_1bc(xl,ul,xr,ur,t)
pl=ul;
ql=0;
pr=pi*exp(-t);
qr=1;

```

例3 试解以下联立的偏微分方程系统

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t} &= 0.024 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - F(u_1 - u_2) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= 0.170 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + F(u_1 - u_2)\end{aligned}$$

其中 $F(u_1 - u_2) = \exp(5.73(u_1 - u_2)) - \exp(-11.46(u_1 - u_2))$ ，且 $0 \leq x \leq 1$ 和 $t \geq 0$ 。
此联立偏微分方程系统满足以下初边值条件。

(i)初值条件

$$\begin{aligned}u_1(x, 0) &= 1 \\ u_2(x, 0) &= 0\end{aligned}$$

(ii)边值条件

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial x}(0, t) &= 0 \\ u_2(0, t) &= 0 \\ u_1(1, t) &= 1 \\ \frac{\partial u_2}{\partial x}(1, t) &= 0\end{aligned}$$

解 步骤1: 改写偏微分方程为标准式

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} 0.024 & \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ 0.170 & \frac{\partial u_2}{\partial x} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -F(u_1 - u_2) \\ F(u_1 - u_2) \end{bmatrix}$$

因此

$$\begin{aligned}c &= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ f &= \begin{bmatrix} 0.024 & \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ 0.170 & \frac{\partial u_2}{\partial x} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$s = \begin{bmatrix} -F(u_1 - u_2) \\ F(u_1 - u_2) \end{bmatrix}$$

和 $m = 0$ 。另外，左边界条件($x = 0$ 处)。写成

$$\begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.024 \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ 0.170 \frac{\partial u_2}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

即

$$pl = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \end{bmatrix}, \quad ql = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

同理，右边界条件($x = 1$ 处)为

$$\begin{bmatrix} u_1 - 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.024 \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ 0.170 \frac{\partial u_2}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

即

$$pr = \begin{bmatrix} u_1 - 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad qr = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

步骤 2: 编写偏微分方程的系数向量函数。

```
function [c,f,s]=ex20_2pdefun(x,t,u,dudx)
c=[1 1]';
f=[0.024 0.170]'.*dudx;
y=u(1)-u(2);
F=exp(5.73*y)-exp(-11.47*y);
s=[-F F]';
```

步骤 3: 编写初始条件函数

```
function u0=ex20_2ic(x)
u0=[1 0]';
```

步骤 4: 编写边界条件函数

```
function [pl,ql,pr,qr]=ex20_2bc(xl,ul,xr,ur,t)
pl=[0 ul(2)]';
ql=[1 0]';
pr=[ur(1)-1 0]';
qr=[0 1]';
```

步骤 5: 取点。

由于此问题的端点均受边界条件的限制,且时间 t 很小时状态的变动很大(由多次求解后的经验得知),故在两端点处的点可稍微密集些。同时对于 t 小处亦可取密一些。例如,

```
x=[0 0.005 0.01 0.05 0.1 0.2 0.5 0.7 0.9 0.95 0.99 0.995 1];
t=[0 0.005 0.01 0.05 0.1 0.5 1 1.5 2];
```

以上几个主要步骤编写完成后,事实上就可直接完成主程序来求解。此问题的参考程序如下:

```
function ex20_2
%*****
```

```

%求解一维偏微分方程组的一个综合函数程序
%*****
m=0;
x=[0 0.005 0.01 0.05 0.1 0.2 0.5 0.7 0.9 0.95 0.99 0.995 1];
t=[0 0.005 0.01 0.05 0.1 0.5 1 1.5 2];
%*****
%利用 pdepe 求解
%*****
sol=pdepe(m,@ex20_2pdefun,@ex20_2ic,@ex20_2bc,x,t);
u1=sol(:,1); %第一个状态之数值解输出
u2=sol(:,2); %第二个状态之数值解输出
%*****
%绘图输出
%*****
figure(1)
surf(x,t,u1)
title('u1 之数值解')
xlabel('x')
ylabel('t')
%
figure(2)
surf(x,t,u2)
title('u2 之数值解')
xlabel('x')
ylabel('t')
%*****
%pde 函数
%*****
function [c,f,s]=ex20_2pdefun(x,t,u,dudx)
c=[1 1]';
f=[0.024 0.170]'.*dudx;
y=u(1)-u(2);
F=exp(5.73*y)-exp(-11.47*y);
s=[-F F]';
%*****
%初始条件函数
%*****
function u0=ex20_2ic(x)
u0=[1 0]';
%*****
%边界条件函数
%*****
function [pl,ql,pr,qr]=ex20_2bc(xl,ul,xr,ur,t)
pl=[0 ul(2)]';
ql=[1 0]';
pr=[ur(1)-1 0]';
qr=[0 1]';

```

3.3 化工应用实例

例 4 触媒反应装置内温度及转换率的分布

以外部热交换式的管形固定层触媒反应装置，进行苯加氢反应产生环己烷。此反应系统之质量平衡及热平衡方程式如下：

$$-\frac{\partial T}{\partial L} + \frac{k_e}{GC_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{r_A \rho_B (-\Delta H_r)}{GC_p} = 0$$

$$-\frac{\partial f}{\partial L} + \frac{D_e}{u} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{r_A \rho_B M_{ar}}{G y_0} = 0$$

其中 T 为温度($^{\circ}\text{C}$)， f 为反应率， L 为轴向距离， r 为径向距离。此系统的边界条件为

$$L = 0, \quad T = T_0(r), \quad f = f_0(r)$$

$$r = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial r} = 0$$

$$r = r_w, \quad -k_e \frac{\partial T}{\partial r} = h_w (T - T_w)$$

$$r = r_w, \quad \frac{\partial f}{\partial r} = 0$$

此外，式中之相关数据及操作条件如下：

(i) 反应速率式

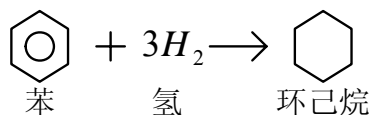


图1 反应示意图

$$r_A = \frac{k K_H^3 K_B P_H^3 P_B}{(1 + K_H P_H + K_B P_B + K_C P_C)^4}$$

其中 P 表示分压(atm)，而速率参数为

$$\ln K = -12100/RT + 32.3/R$$

$$\ln K_H = 15500/RT - 31.9/R$$

$$\ln K_B = 11200/RT - 23.1/R$$

$$\ln K_C = 8900/RT - 19.4/R$$

上式中，下标 B, H 及 C 分别代表苯，氢及环己烷。R 为理想气体常数(1.987cal/mol·K)。

(ii) 操作条件及物性数据

总压	$P_t = 1.25 \text{ atm}$
反应管管径	$r_w = 2.5 \text{ cm}$
壁温	$T_w = 100^{\circ}\text{C}$
质量速度	$G = 631 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{hr}$
苯对氢之莫耳流量比	$m = 30$
反应管入口的苯之莫耳分率	$y_0 = 0.0323$
反应气体之平均分子量	$M_{av} = 4.47$

触煤层密度	$P_B = 1200 \text{ kg/m}^3$
流体平均比热	$C_p = 1.74 \text{ kcal/kg} \cdot \text{mol}$
反应热	$\Delta H_r = -49250 \text{ kcal/kg} \cdot \text{mol}$
整体传热系数	$h_0 = 65.8 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{hr} \cdot ^\circ\text{C}$
进料温度	$T(0) = 125^\circ\text{C}$
反应管管长	$L = 45 \text{ cm}$
流速	$u = 8.03 \text{ m/hr}$
有效热传导系数	$K_e = 0.65 \text{ kcal/m} \cdot \text{hr} \cdot ^\circ\text{C}$
壁境膜传热系数	$h_w = 112 \text{ kcal/m}^2 \cdot \text{hr} \cdot ^\circ\text{C}$
有效扩散系数	$D_e = 0.755 \text{ m}^2/\text{hr}$

题意解析：

因反应速率式 r_A 与分压有关，而分压又与反应率 f 有关。故需进一步将 r_A 由反应率 f 表示，方能求解偏微分方程。基于以下的反应方程

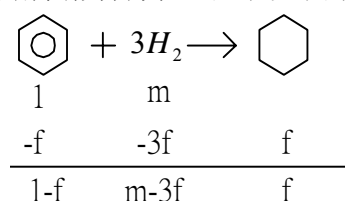


图2 反应方程

则各分压与总压之关系为

$$\begin{aligned}
 P_H &= P_t \frac{m-3f}{1+m-3f} \\
 P_B &= P_t \frac{m-f}{1+m-3f} \\
 P_C &= P_t \frac{f}{1+m-3f}
 \end{aligned}$$

将上式，连同反应速率式，带入平衡方程式中，配合边界条件，可利用 pdepe 求解。

MATLAB 程序设计

将原方程改写成如式 (35) 的标准式

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial L} \\ \frac{\partial f}{\partial L} \end{bmatrix} = r^{-1} \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} r \frac{k_e}{GC_p} \frac{\partial T}{\partial r} \\ r \frac{D_e}{u} \frac{\partial f}{\partial r} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{r_A \rho_B (-\Delta H_r)}{GC_p} \\ \frac{r_A \rho_B M_{av}}{Gy_0} \end{bmatrix}$$

因此

$$\tilde{c} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \tilde{f} = \begin{bmatrix} \frac{k_e}{GC_p} & \frac{\partial T}{\partial r} \\ \frac{D_e}{u} & \frac{\partial f}{\partial r} \end{bmatrix}, \quad \tilde{s} = \begin{bmatrix} \frac{r_A \rho_B (-\Delta H_r)}{GC_p} \\ \frac{r_A \rho_B M_{av}}{Gy_0} \end{bmatrix}$$

和 $m = +1$ (圆柱)。另外，左边界条件($r = 0$ 处)写成

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \tilde{f} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

即

$$pl = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad ql = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

同理右边界条件($r = r_w$)可写成

$$\begin{bmatrix} h_w(T - T_w) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} +GC_p \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \tilde{f} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

即

$$pr = \begin{bmatrix} h_w(T - T_w) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad qr = \begin{bmatrix} +GC_p \\ 0 \end{bmatrix}$$

根据以上的分析，可编写 MATLAB 程序求解此 PDE 问题，其参考程序如下：

```
function ex60_3_1
%*****
% 触媒反应器内温度及转化率的分布
%*****
global Pt rw Tw G M y0 Mav rho_B Cp dHr h0 u R ke hw De
%*****
% 给定数据
%*****
Pt=1.25; %总压(atm)
rw=0.025; %管径(m)
Tw=100+273; %壁温(℃)
G=631; %质量流率(kg/m2hr)
M=30;
y0=0.0323;
Mav=4.47;
rho_B=1200;
Cp=1.74;
dHr=-49250;
h0=65.8;
T0=125+273;
Lw=1;
u=8.03;
R=1.987;
ke=0.65;
hw=112;
De=0.755;
%*****
```

```

m=1;
%*****
% 取点
%*****
r=linspace(0,rw,10);
L=linspace(0,Lw,10);
%*****
% 利用 pdepe 求解
%*****
sol=pdepe(m,@ex20_3_1pdefun,@ex20_3_1ic,@ex20_3_1bc,r,L);
T=sol(:, :, 1); %温度
f=sol(:, :, 2); %反应率
%*****
% 绘图输出
%*****
figure(1)
surf(L,r,T'-273)
title('temp')
xlabel('L')
ylabel('r')
zlabel('temp (0C)')
%
figure(2)
surf(L,r,f')
title('reaction rate')
xlabel('L')
ylabel('r')
zlabel('reaction rate')
%*****
% PDE 函数
%*****
function [c1,f1,s1]=ex20_3_1pdefun(r,L,u1,DuDr)
global Pt rw Tw G M y0 Mav rho_B Cp dHr h0 u R ke hw De
T=u1(1);
f=u1(2);
%
k=exp(-12100/(R*T)+32.3/R);
Kh=exp(15500/(R*T)-31.9/R);
Kb=exp(11200/(R*T)-23.1/R);
Kc=exp(8900/(R*T)-19.4/R);
%
a=1+M-3*f;
ph=Pt*(M-3*f)/a;
pb=Pt*(1-f)/a;
pc=Pt*f/a;
%
rA=k*Kh^3*Kb*ph^3*pb/(1+Kh*ph+Kb*pb+Kc*pc)^4;
%
c1=[1 1]';
f1=[ke/(G*Cp) De/u]'.*DuDr;
% s1=[ke/(G*Cp*r)*DuDr(1)-rA*rho_B*dHr/(G*Cp)-2*h0*(T-Tw)/(rw)
s1=[-rA*rho_B*dHr/(G*Cp);rA*rho_B*Mav/(G*y0)];
%*****

```

```

%初始条件函数
%*****
function u0=ex20_3_1ic(x)
u0=[125+273 0]';
%*****
% 边界条件档
%*****
function [pl,ql,pr,qr]=ex20_3_1bc(r1,ul,rr,ur,L)
global Pt rw Tw G M y0 Mav rho_B Cp dHr h0 u R ke hw De
pl=[0 0]';
ql=[1 1]';
pr=[hw*(ur(1)-Tw) 0]';
qr=[G*Cp 1]';

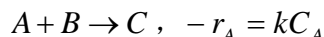
```

例 5 扩散系统之浓度分布

参考如图 3 的装置。管中储放静止液体 B，高度为 $L=10\text{ cm}$ ，放置于充满 A 气体的环境中。假设与 B 液体接触面之浓度为 $C_{A0} = 0.01\text{ mol/m}^3$ ，且此浓度不随时间改变而改变，即在操作时间内 ($h=10$ 天) 维持定值。气体 A 在液体 B 中之扩散系数为 $D_{AB} = 2 \times 10^{-9}\text{ m}^2/\text{s}$ 。试决定以下两种情况下，气体 A 溶于液体 B 中之流通量(flux)。

(a) A 与 B 不发生反应；

(b) A 与 B 发生以下之反应



其反应速率常数 $k = 2 \times 10^{-7}\text{ s}^{-1}$ 。

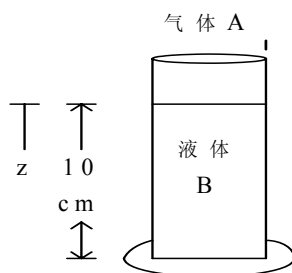


图 3 气体 A 在液体 B 中的扩散

题意解析：

(a) 因气体 A 与液体 B 不发生反应，故其扩散现象的质量平衡方程如下：

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}$$

依题意，其初始及边界条件为

$$\text{I.C. } C_A(z, 0) = 0, \quad z > 0$$

$$\text{B.C. } C_A(0, t) = C_{A0}, \quad t \geq 0; \quad \left. \frac{\partial C_A}{\partial z} \right|_{z=L} = 0, \quad t \geq 0$$

(b) 在气体 A 与液体 B 会发生一次反应的情况下，其质量平衡方程需改写为

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + kC_A$$

而起始及边界条件同上。

在获得浓度分布后，即可以 Fick's law

$$N_{Az}(t) = -D_{AB} \left. \frac{\partial C_A}{\partial z} \right|_{z=0}$$

计算流通量。

MATLAB 程序设计：

此问题依旧可以利用 pdepe 迅速求解。现就各状况的处理过程简述如下。

(a)与标准式 (35) 比较，可得 $C = 1$ ， $f = D_{AB} \partial C_A / \partial z$ ， $s = 0$ ，和 $m = 0$ 。另外，经与式 (37) 比较后得知，左边界及右边界条件之系数分别为

左边界($z = 0$): $pl = C_A(0, t) - C_{A0}$ ， $ql = 0$ 。

右边界($z = L$): $pr = 0$ ， $qr = \frac{1}{D_{AB}}$ 。

(b)与标准式 (35) 比较，可得 $m = 0$ ， $C = 1$ ， $f = D_{AB} \partial C_A / \partial z$ ，和 $s = kC_A$ 。而边界条件之系数同(a)之结果。

利用以上的处理结果，可编写 MATLAB 参考程序如下：

```
function ex20_3_2
%*****
% 扩散系统之浓度分布
%*****
clear
clc
global DAB k CA0
%*****
% 给定数据
%*****
CA0=0.01;
L=0.1;
DAB=2e-9;
k=2e-7;
h=10*24*3600;
%*****
% 取点
%*****
t=linspace(0,h,100);
z=linspace(0,L,10);
%*****
% case (a)
%*****
m=0;
sol=pdepe(m,@ex20_3_2pdefuna,@ex20_3_2ic,@ex20_3_2bc,z,t);
CA=sol(:, :, 1);
for i=1:length(t)
    [CA_i,dCAdz_i]=pdeval(m,z,CA(i,:),0);
    NAz(i)=-dCAdz_i*DAB;
end
figure(1)
subplot(211)
surf(z,t/(24*3600),CA)
title('case (a)')
```

```

xlabel('length (m)')
ylabel('time (day)')
zlabel('conc. (mol/m^3)')
subplot(212)
plot(t/(24*3600),NAz'*24*3600)
xlabel('time (day)')
ylabel('flux (mol/m^2.day)')
%*****
% case (b)
%*****
m=0;
sol=pdepe(m,@ex20_3_2pdefunb,@ex20_3_2ic,@ex20_3_2bc,z,t);
CA=sol(:, :, 1);
for i=1:length(t)
    [CA_i,dCAdz_i]=pdeval(m,z,CA(i,:),0);
    NAz(i)=-dCAdz_i*DAB;
end
%
figure(2)
subplot(211)
surf(z,t/(24*3600),CA)
title('case (b)')
xlabel('length (m)')
ylabel('time (day)')
zlabel('conc. (mol/m^3)')
subplot(212)
plot(t/(24*3600),NAz'*24*3600)
xlabel('time (day)')
ylabel('flux (mol/m^2.day)')
%*****
% PDE 函数
%*****
% case (a)
%*****
function [c,f,s]=ex20_3_2pdefuna(z,t,CA,dCAdz)
global DAB k CA0
c=1;
f=DAB*dCAdz;
s=0;
%*****
% case (a)
%*****
function [c,f,s]=ex20_3_2pdefunb(z,t,CA,dCAdz)
global DAB k CA0
c=1;
f=DAB*dCAdz;
s=k*CA;
%*****
% 初始条件函数
%*****
function CA_i=ex20_3_2ic(z)
CA_i=0;
%*****

```

```
% 边界条件函数
%*****
function [pl,ql,pr,qr]=ex20_3_2bc(zl,CA1,zr,CAr,t)
global DAB k CA0
pl=CA1-CA0;
ql=0;
pr=0;
qr=1/DAB;
```

§4 二维状态空间的偏微分方程的 MATLAB 解法

MATLAB 中的偏微分方程 (PDE) 工具箱是用有限元法寻求典型偏微分方程的数值近似解, 该工具箱求解偏微分方程具体步骤与用有限元方法求解偏微分方程的过程是一致的, 包括几个步骤, 即几何描述、边界条件描述、偏微分方程类型选择、有限元划分计算网格、初始化条件输入, 最后给出偏微分方程的数值解 (包括画图)。

下面我们讨论的方程是定义在平面上的有界区域 Ω 上, 区域的边界记作 $\partial\Omega$ 。

4.1 方程类型

MATLAB 工具箱可以解决下列类型的偏微分方程:

(i) 椭圆型偏微分方程

$$-\nabla \cdot (c \nabla u) + au = f \quad \text{in } \Omega$$

其中 c, a, f 和未知的 u 可以是 Ω 上的复值函数。

(ii) 抛物型偏微分方程

$$d \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u) + au = f \quad \text{in } \Omega$$

其中 c, a, f, d 可以依赖于时间 t 。

(iii) 双曲型偏微分方程

$$d \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla \cdot (c \nabla u) + au = f \quad \text{in } \Omega$$

(iv) 特征值问题

$$-\nabla \cdot (c \nabla u) + au = \lambda du \quad \text{in } \Omega$$

其中 λ 是未知的特征值, d 是 Ω 上的复值函数。

(v) 非线性椭圆偏微分方程

$$-\nabla \cdot (c(u) \nabla u) + a(u)u = f(u) \quad \text{in } \Omega$$

其中 c, a, f 可以是 u 的函数。

(vi) 方程组

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (c_{11} \nabla u_1) - \nabla \cdot (c_{12} \nabla u_2) + a_{11}u_1 + a_{12}u_2 = f_1 \\ -\nabla \cdot (c_{21} \nabla u_1) - \nabla \cdot (c_{22} \nabla u_2) + a_{21}u_1 + a_{22}u_2 = f_2 \end{cases}$$

4.2 边界条件

边界条件有如下三种:

(i) Dirichlet 条件: $hu = r$ on $\partial\Omega$ 。

(ii) Neumann 条件: $\vec{n} \cdot (c \nabla u) + qu = g$ on $\partial\Omega$ 。

这里 \vec{n} 为区域的单位外法线, h, r, q, g 是定义在 $\partial\Omega$ 上的复值函数。

对于二维方程组情形, Dirichlet 边界条件为

$$h_{11}u_1 + h_{12}u_2 = r_1,$$

$$h_{21}u_1 + h_{22}u_2 = r_2;$$

Neumann 边界条件为:

$$\vec{n} \cdot (c_{11}\nabla u_1) + \vec{n} \cdot (c_{12}\nabla u_2) + q_{11}u_1 + q_{12}u_2 = g_1$$

$$\vec{n} \cdot (c_{21}\nabla u_1) + \vec{n} \cdot (c_{22}\nabla u_2) + q_{21}u_1 + q_{22}u_2 = g_2$$

(iii) 对于偏微分方程组, 混合边界条件为

$$h_{11}u_1 + h_{12}u_2 = r_1$$

$$\vec{n} \cdot (c_{11}\nabla u_1) + \vec{n} \cdot (c_{12}\nabla u_2) + q_{11}u_1 + q_{12}u_2 = g_1 + \mu h_{11}$$

$$\vec{n} \cdot (c_{21}\nabla u_1) + \vec{n} \cdot (c_{22}\nabla u_2) + q_{21}u_1 + q_{22}u_2 = g_2 + \mu h_{12}$$

这里 μ 的计算是使得满足 Dirichlet 边界条件。

4.3 求解偏微分方程

例 6 求解泊松方程

$$-\nabla^2 u = 1,$$

求解区域为单位圆盘, 边界条件为在圆盘边界上 $u = 0$ 。

解 它的精确解为

$$u(x, y) = \frac{1 - x^2 - y^2}{4}$$

下面求它的数值解, 编写程序如下:

```
% (1) 问题定义
g='circleg';           %单位圆
b='circleb1';          %边界上为零条件
c=1;a=0;f=1;
% (2) 产生初始的三角形网格
[p,e,t]=initmesh(g);
% (3) 迭代直至得到误差允许范围内的合格解
error=[]; err=1;
while err > 0.01,
[p,e,t]=refinemesh(g,p,e,t);
u=asempde(b,p,e,t,c,a,f); %求得数值解
exact=(1-p(1,:).^2-p(2,:).^2)/4;
err=norm(u-exact',inf);
error=[error err];
end
%结果显示
subplot(2,2,1),pdemesh(p,e,t);
subplot(2,2,2),pdesurf(p,t,u)
subplot(2,2,3),pdesurf(p,t,u-exact')
```

例7 考虑最小表面问题

$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{1+|\nabla u|^2}} \nabla u \right) = 0 \quad \text{在} \quad \Omega = \{(x, y) | x^2 + y^2 \leq 1\},$$

在圆盘边界上 $u = x^2$ 。

解 这是椭圆型方程, 其中 $c = \frac{1}{\sqrt{1+|\nabla u|^2}}, a = 0, f = 0$, 编写程序如下:


```

g='circleg';
b='circleb2';
c='1./sqrt(1+ux.^2+uy.^2)';
rtol=1e-3;
[p,e,t]=initmesh(g);
[p,e,t]=refinemesh(g,p,e,t);
u=pdenonlin(b,p,e,t,c,0,0,'Tol',rtol);
pdesurf(p,t,u)

```

例8 求解正方形区域 $\{(x, y) | -1 \leq x, y \leq 1\}$ 上的热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$$

$$\text{初始条件为 } u(0) = \begin{cases} 1, & x^2 + y^2 < 0.4^2 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

边界条件为Dirichlet条件 $u = 0$ 。

解 这里是抛物型方程，其中 $c = 1, a = 0, f = 0, d = 1$ 。编写程序如下：

```

%(1)问题定义
g='squareg';           %定义正方形区域
b='squareb1';          %边界上为零条件
c=1;a=0;f=0;d=1;
%(2)产生初始的三角形网格
[p,e,t]=initmesh(g);
%(3)定义初始条件
u0=zeros(size(p,2),1);
ix=find(sqrt(p(1,:).^2+p(2,:).^2)<0.4);
u0(ix)=1;
%(4)在时间段为0到0.1的20个点上求解
nframe=20;
tlist=linspace(0,0.1,nframe);
u1=parabolic(u0,tlist,b,p,e,t,c,a,f,d);
%(5)动画图示结果
for j=1:nframe
    pdesurf(p,t,u1(:,j));
    mv(j)=getframe;
end
movie(mv,10)

```

例9 求解正方形区域 $\{(x, y) | -1 \leq x, y \leq 1\}$ 上的波方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u$$

初始条件为 $u(0) = \arctan(\cos(\pi x))$, $\frac{du(0)}{dt} = 3\sin(\pi x)\exp(\cos(\pi y))$, 边界条件为在

$x = \pm 1$ 上满足Dirichlet条件 $u = 0$, 在 $y = \pm 1$ 上满足Neumann条件 $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ 。

解 这里是双曲型方程，其中 $c = 1, a = 0, f = 0, d = 1$ 。编写程序如下：

```

%(1)问题定义

```

```

g='squareg';          %定义正方形区域
b='squareb3';         %定义边界
c=1;a=0;f=0;d=1;
% (2) 产生初始的三角形网格
[p,e,t]=initmesh(g);
%(3)定义初始条件
x=p(1,:);y=p(2,:);
u0=atan(cos(pi*x));
ut0=3*sin(pi*x).*exp(cos(pi*y));
%(4)在时间段为0到5的31个点上求解
n=31;
tlist=linspace(0,5,n);
uu=hyperbolic(u0,ut0,tlist,b,p,e,t,c,a,f,d);
%(5)动画图示结果
for j=1:n
    pdesurf(p,t,uu(:,j));
    mv(j)=getframe;
end
movie(mv,10)

```

例 10 求解泊松方程

$$-\nabla^2 u = \delta(0,0),$$

求解区域为单位圆盘，边界条件为在圆盘边界上 $u = 0$ 。

解 它的精确解为

$$u(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \ln \sqrt{x^2 + y^2}。$$

下面求它的数值解，编写程序如下：

```

g='circleg';
b='circleb1';
c=1;a=0;f='circlef';
[p,e,t]=initmesh(g);
[p,e,t]=refinemesh(g,p,e,t);
u=asempde(b,p,e,t,c,a,f);
exact=-1/(2*pi)*log(sqrt(p(1,:).^2+p(2,:).^2));
subplot(2,2,1),pdemesh(p,e,t);
subplot(2,2,2),pdesurf(p,t,u)
subplot(2,2,3),pdesurf(p,t,u-exact')

```

4.4 偏微分方程的 pdetool 解法

4.4.1 图形界面解法简介

对于一般的区域，任意边界条件的偏微分方程，我们可以利用 MATLAB 中 pdetool 提供的偏微分方程用户图形界面解法。

图形界面解法步骤大致上为：


- (1) 定义 PDE 问题，包括二维空间范围，边界条件以及 PDE 系数等。
- (2) 产生离散化点，并将原 PDE 方程式离散化。
- (3) 利用有限元素法(finite element method; FEM)求解并显示答案。


在说明此解法工具之前，先介绍此 PDE 图形界面的菜单下方的功能图标(icon)按钮。





透过这些按钮，使用者可轻松地完成偏微分方程的求解。现将这些按钮的主要功能叙述如下：


前五个按钮为 PDE 系统之边界范围绘制功能，由左至右之用法为：

：以对角绘制矩形或正方形。按住鼠标左键可绘制矩形，而正方形需以按住右键的方式绘制。


：从中心点至某一角边的方式绘制矩形或正方形。同样地，鼠标左键绘矩形，右键绘正方形。

：由周围界线的方式绘制椭圆或圆形区域。鼠标左键用以绘制椭圆，而右键用来绘制圆形图形。


：以中心点向外的方式绘制椭圆或圆。同样地，鼠标左及右键，分别用以绘制椭圆及圆形的区域。


：用以绘制多边形等不规则区域，欲关闭此功能需按鼠标右键。


在这些绘制按钮之后的按钮功能依序如下：


：用以给定边界条件。在此功能选定后，使用者可在任一图形边界上按住鼠标左键双击，然后在对话框中输入边界条件。


：用以指定 PDE 问题及相关参数。

：产生图形区域内离散化的网点。

：用以进一步将离散化的网点再取密一点(refine mesh)。

：在指定 PDE 系统，边界条件及区域后，按此按钮即开始解题。

：用以指定显示结果绘制方式。

：放大缩小功能，便于图形绘制及显示。

4.4.2 图形界面解法的使用步骤

要利用 pdetool 接口求解之前，需先定义 PDE 问题，其包含三大部份：

- (1) 利用绘图(draw)模式，定义欲解问题的空间范围(domain) Ω 。
- (2) 利用 boundary 模式，指定边界条件。
- (3) 利用 PDE 模式，指定 PDE 系数，即输入 c ， a ， f 和 d 等 PDE 模式中的系数。


在定义 PDE 问题之后，可依以下两个步骤求解

- (1) 在 mesh 模式下，产生 mesh 点，以便将原问题离散化。
- (2) 在 solve 模式下，求解。
- (3) 最后，在 Plot 模式下，显示答案。

下面以 *Poisson's* 方程式 $-\Delta u = f$ 的求解为例，详细说明 pdetool 的用法。此问题的几何图形及相关边界条件，将于求解过程中加以说明。

步骤 1：在命令窗口中键入 pdetool 以进入 GUI(graphical user interface)界面。选取 Options 中之 Grid 功能，以显示网格线。

步骤 2：利用 Draw 功能，画出问题之几何图形。请注意：使用者可利用内定对象“多边形”，“矩形”，“正方形”，“圆形”，及“椭圆型”，予以组合，例如

(i)先选取“矩形/正方形”对象，移动鼠标至所欲输入左上角点，如坐标(-1,0)点，按住鼠标左键，往右下角拉至坐标为(1,-0.4)处，即形成代号为 R1 的矩形。其余图

形 C1, R1 和 C2 可选取适当对象并类似地画出, 以形成如图 4 的图形区域。以代数公式而言, 其为 $R1+C1+R2+C2$

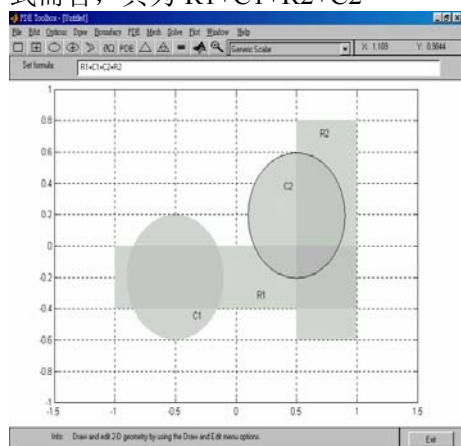


图 4 画求解区域

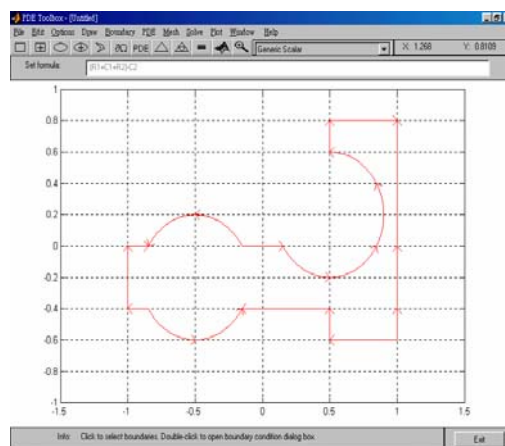


图 5 求解区域图

值得注意的是, 圆形区域需以按住鼠标右键的方式来制作(非左键)。同时, 如欲进一步修改各图形对象之大小及位置数据, 可在该图上双击鼠标左键, 然后在对象对话框上输入数据。

(ii)若所欲形成的图形区域, 需将 C2 去除, 则可在公式列中直接输入 $R1+C1+R2-C2$ 即可。

步骤 3: 选取 PDE 功能项, 以输入 PDE 方程的系数及类型。因问题为 $-\Delta u = f$, 故此为椭圆型的问题, 且其标准形式为 $-\nabla \cdot (c \nabla u) + au = f$, 比较得知, $c=1$, $a=0$ 和 $f=10$, 所以对对话框输入的情况如图 6。

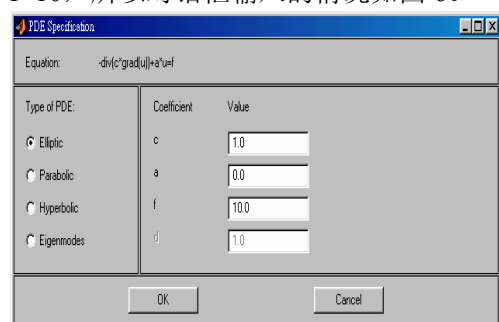


图 6 对话框输入

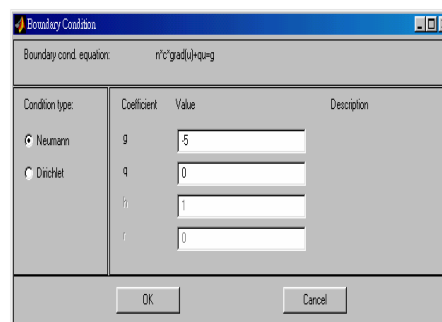



图 7 对话框输入

步骤 4: 选取 Boundary 功能, 以输入边界条件。假设边界条件为 Neumann 形, 且为 $\partial u / \partial n = 5$ 。其中在弧形部份与标准式知, $g=-5$ 且 $q=0$ 。但直线部分其边界条件则在 Dirichlet type 使 $h=0$, $r=0$ 。对话框输入情况见图 7。

步骤 5: 选取 Mesh 功能, 产生网点。使用者亦可进一步利用  将网点取得密一点(refine mesh), 见图 8。

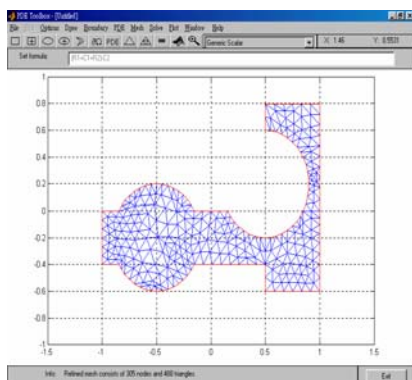


图 8 网格剖分求解区域

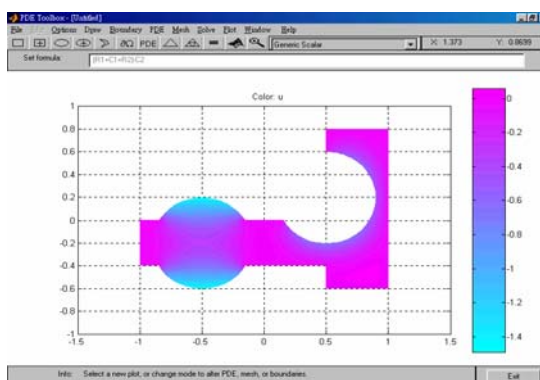


图 9 求解结果示意图

步骤 6: 选取 solve 功能, 解此 PDE, 见图 9。

注意:

1. MATLAB 会以图形的方式展示结果, 使用者亦可点选 plot 下之“parameters”功能, 选择适当的方式显示图形及数据。例如用 3D 方式显示求解结果。参数设置见图 10, 显示结果见图 11。

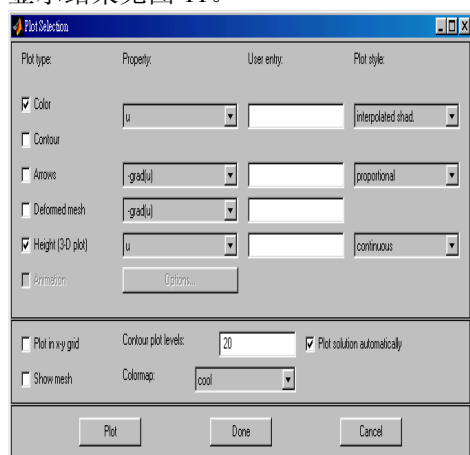


图 10 显示参数设置

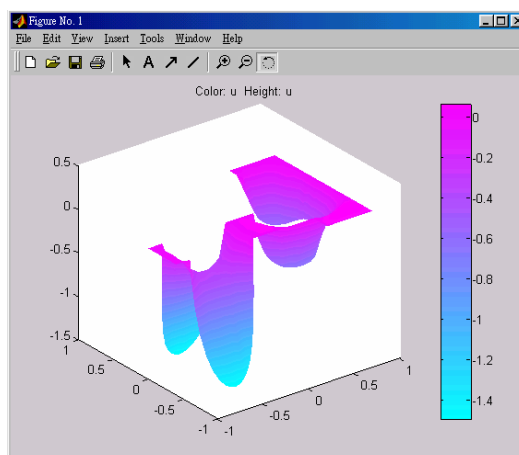


图 11 求解结果显示

2. 另外, 若使用者欲将结果输出到命令窗口中, 以供后续处理, 可利用 solve 功能项下之“export solution”指定变量名称来完成。

3. 如果求抛物型或双曲型方程的数值解, 还需要通过“solve”菜单下的“parameters...”选项设置初值条件。

4. 在上面定义边界条件和初始条件时, 可以使用一些内置变量。

(1) 在边界条件输入框中, 可以使用如下变量:

二维坐标 x 和 y , 边界线段长度参数 s (s 是以箭头的方向沿边界线段从 0 增加到 1), 外法向矢量的分量 n_x 和 n_y (如果需要边界的切线方向, 可以通过 $t_x = -n_y$ 和 $t_y = n_x$ 表示), 解 u 。

(2) 在初值条件的输入框中, 也可以输入用户定义的 MATLAB 可接受变量 (p , e , t , x , y) 的函数。

例 11 使用 PDETOOL 重新求例 8 的数值解。

1) 定义 PDE 问题, 包括二维空间范围, 边界条件以及 PDE 系数等。我们这里就省略了。

2) 区域剖分以后, 通过 “Mesh” 菜单下的 “Export Mesh...” 选项可以把 p, e, t 三个参数分别输出到工作间。

3) 然后编写函数 fun1(x,y)如下:

```
function f=fun1(x,y);
f=zeros(length(x),1);
ix=find(x.^2+y.^2<0.16);
f(ix)=1;
```

其中的变量 x, y 是 MATLAB 可接受的内置变量。

设置 “solve” 菜单下的 “parameters...” 选项如下:

时间框中输入: linspace(0,0.1,20);

初值框中输入: fun1。

4) 设置 “plot” 菜单下的 “parameters...” 选项如下: 选择 Height(3-D plot) 和 Animation 两项。

5) 用鼠标点一下工具栏上的 “=” 按钮, 就可以画出数值解的 3-D 图形。

习 题 二 十

1. 求二维拉普拉斯方程

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

在边界条件 $u(x, y)|_{x=0} = u(x, y)|_{x=6} = u(x, y)|_{y=0} = 0$, $u(x, y)|_{y=2} = 10$ 下的数值解。

2. 求初边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t > 0, 0 < x < 1 \\ u(x, 0) = 1, & 0 \leq x \leq 1 \\ u'_x(0, t) - u(0, t) = 0 \\ u'_x(1, t) + u(1, t) = 0 \end{cases} \quad t \geq 0$$

在 $0 \leq t \leq 3$ 范围内的数值解。

3. 求热传导方程初边值问题

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & 0 < x < 1, 0 < t < 0.5 \\ u(x, 0) = \sin \pi x & 0 \leq x \leq 1 \\ u(0, t) = u(1, t) = 0 & 0 \leq t \leq 0.5 \end{cases}$$

的数值解, 并将计算结果与准确解 $u(x, t) = e^{-\pi^2 t} \sin \pi x$ 比较。