[理论物理与应用物理学研究]

热传导方程有限差分法的 MATLAB 实现

史策

(西安建筑科技大学 理学院, 陕西 西安 710055)

摘 要:对于有界热传导齐次方程的混合问题,用分离变量法求解往往很复杂。为了更好地理解热传导方程的解,使用 MATLAB 软件将方程的解用图像表示出来。通过区域转换的思想,利用 MATLAB 编程实现一定区域内热传导方程的有限差分方法,数值表明了方法的可行性和稳定性。

关键词:热传导方程;有限差分;MATLAB 中图分类号:0552 文献标识码: A 文章编号:1672-2914(2009)04-0027-03

近些年来,求解热传导方程的数值方法^[1]取得进展,特别是有限差分区域分解算法^[2],此类算法的特点是在内边界处设计不同于整体的格式,将全局的隐式计算化为局部的分段隐式计算。使人从感觉上认为这样得到的解会比全局隐式得到的解的精度差,但大量的数值实验表明事实正好相反,用区域分解算法求得的解的精度更好。

MATLAB 具有强大的图形绘制功能^[3],为科学计算和图形处理提供了很大的方便。用户只须指定绘图方式,并提供充足的绘图数据,用很少的程序指令就可得到直观、形象的图形结果。因此,近些年来,越来越多的人开始使用 MATLAB 来求解热传导方程^[4,5]。借助 MATLAB 的数值计算和图形处理技术^[6],我们可以绘制出热传导方程数值解的二维、三维图形,从而可以更好地理解热传导方程解的意义。

一维热传导方程
$$\frac{\partial u}{\partial t}$$
= $a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$,

是最简单的偏微分方程之一,其定解问题的数值解法主要有有限元法和有限差分法等,对于有限元法来说,适用处理复杂区域、精度可选;缺点在于内存和计算量巨大,不易编程实现。对于有限差分法来说,虽然比较直观、理论也比较成熟、精度可选;但是不规则区域处理繁琐,网格生成可以使有限差分方法^[7] (FDM)应用于不规则区域,但是对区域的连续性等要求较严。适用 FDM 的好处在易于编程,易于并

行。鉴于以上情况,本文考虑以下边界值问题:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, 0 < l, t > 0 \\ u|_{x=0} = 0, u|_{x=1} = 0, t > 0 \\ u|_{x=0} = \sin\left(\frac{\pi x}{l}\right), 0 < x < l \end{cases}$$

利用区域转化的思想通过极坐标对求解区域进行转化,求解区域划分为差分网格,用有限个网格节点代替连续的求解域。有限差分法以 Taylor 级 数展开等方法,把控制方程中的导数用网格节点上的函数值的差商代替进行离散,从而 建立以网格节点上的值为未知数的代数方程组。

1 求解热传导方程的基本思想

基本思想是把连续的定解区域用有限个离散点构成的网格来代替,这些离散点称作网格的节点;把连续定解区域上的连续变量的函数用在网格上定义的离散变量函数来近似;把原方程和定解条件中的微商用差商来近似,积分用积分和来近似,于是原微分方程和定解条件就近似地代之以代数方程组,即有限差分方程组,解此方程组就可以得到原问题在离散点上的近似解。然后再利用插值方法便可以从离散解得到定解问题在整个区域上的近似解[8.9]。下面是有限差分法数值计算的基本步骤:

- (1)区域的离散或子区域的划分:
- (2)插值函数的选择;
- (3)方程组的建立;
- (4)方程组的求解。

收稿日期 2009-04-20

作者简介:史 策(1986-),男,陕西兴平市人,西安建筑科技大学理学院硕士研究生,研究方向为微分方程数值解法。

2 热传导方程的离散分析

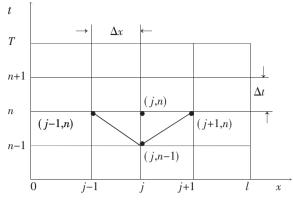


图 1 热传导方程隐格式网格划分

通过已知方程,建立一个关于时间和步长 (x-t) 坐标)的函数,设步长为 $\Delta x=1/M$,每次运行的时间为 $\Delta t=T/N$,这样就把初始的矩形区域划分成了一个长方形的网格,本文就是通过对原方程建立的差分格式,以及对初始条件和边界条件建立相应的差分近似进行计算,即把原方程离散到各个节点上从而进行数值近似解的计算。

利用
$$u(x,t)$$
关于 t 的向后差商[10]: $\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t}$,

关于 t 的二阶中心差商[10]: $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2},$ 对方

程进行离散。 离散后的方程为:

$$\frac{u_{j}^{n}-u_{j}^{n-1}}{\Delta t}=a^{2}\frac{u_{j+1}^{n}-2u_{j}^{n}+u_{j-1}^{n}}{(\Delta x)^{2}}\,, \ \ \diamondsuit:r=\frac{a^{2}\cdot\Delta t}{(\Delta x)^{2}}\,,$$
即

 $(1+2r)u_{j}^{n}-r\cdot u_{j+1}^{n}-r\cdot u_{j-1}^{n}=u_{j}^{n-1}$ 。 可化为矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} 1+2r & -r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & -r & 1+2r & -r & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -r & 1+2r \end{pmatrix}_{(M-1)^{\times}} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{M-2}^n \\ u_{M-1}^n \end{pmatrix}}_{n} =$$

$$\begin{pmatrix} u_1^{n-1} + r \cdot u_0^n \\ u_1^{n-1} \\ u_2^{n-1} \\ \vdots \\ u_{M-2}^{n-1} \\ u_{M-1}^{n} + r \cdot u_M^n \end{pmatrix}$$

3 热传导方程的 MATLAB 编程

%热传导方程问题的数值解

clear;clc;

format short e

```
第 24 卷
a=input(' 请输入系数 a 的值:');
l=input(' 请输入长度 l 的值 .');
M=input('请输入将区间[0,1]等分的个数 M:');
ot=input('请输入时间增量 ot 的值:'):
n=input('请输入运行次数 n 的值.');
ox=1/M;x0=zeros(M+1,1);
for ii=1:M
  x0(ii+1)=ii*ox;
u=sin(pi*x0/l); % t=0 时 u(x,t)的值
r=a^2*ot/(ox)^2;
for ii=1:n
 %数据的输入
  B=zeros(M-1,1);%存放系数矩阵主对角线元素
  A=zeros (M-2.1):%存放系数矩阵主对角线元素下
方次对角线的元素
  C=zeros (M-2.1):%存放系数矩阵主对角线元素上
方次对角线的元素
  S=zeros(M-1,1);%存放右端的常数项
  for ii=1:M-2
    B(ii)=1+2*r;A(ii)=-r;C(ii)=-r;
   S(ii)=u(ii+1,1);
  end
    B(M-1)=1+2*r;S(M-1)=u(M,1);u(1,2)=0;u(M+1,
2)=0;
    S(1,1)=S(1,1)+r*u(1,2);S(M-1,1)=S(M-1,1)+r*u
(M+1,2);
  %追赶法
  S(1)=S(1)/B(1);T=B(1);k=2;
  while k \sim = M
    B(k-1)=C(k-1)/T;
   T=B(k)-A(k-1)*B(k-1);
   S(k)=(S(k)-A(k-1)*S(k-1))/T;
   k=k+1;
  end
  k=1:
  while k \sim = M-1
   S(M-1-k)=S(M-1-k)-B(M-1-k)*S(M-k);
   k=k+1;
  end
  u(2:M,2)=S; %把结果放入矩阵 u 中
```

u(:,1)=u(:,2);% 过河拆桥

%计算精确值,存放在 u 的第二列

 $u(x+1,2)=exp(-(pi*a/l)^2*n*ot)*sin(pi*x*ox/l);$

end

for x=0:M

end

%计算最大相对误差

ez=zeros(M-1,1);

for ii=2:M

ez(ii-1)=abs(u(ii,1)-u(ii,2))/u(ii,2);

end

E=max(ez);

fprintf ('最后时刻数值解与精确解分别为:\n');disp (u);

fprintf ('差分法得到的结果与正确结果的最大相对误差为:');

disp([num2str(E*100) '%']);

%画二维图比较

plot(x0,u(:,1),'r:',x0,u(:,2),'b-');

legend(' 数值解 ',' 精确解 ')

xlabel('x'),ylabel('u(x,t)')

title('最后时刻热传导问题数值解与精确解比较')。

4 运行结果分析

通过输入数据:

输入系数 a 的值 · 1

输入长度1的值:1

输入将区间[0,1]等分的个数 M:8

输入时间增量 ot 的值:0.001

输入运行次数 n 的值:90

可以看到最后时刻数值解与精确解如表 1 所示。

差分法得到的数值解与精确解的最大相对误差为: 1.572 3%。

表 1 最后时刻数值解与精确解

数值解	精确解
0	0
1. 599 0e-001	1. 599 0e-001
2. 954 6e-001	2. 908 8e-001
3. 860 3e-001	3. 800 6e-001
4. 178 4e-001	4. 113 7e-001
3. 860 3e-001	3. 800 6e-001
2. 954 6e-001	2. 908 8e-001
1. 599 0e-001	1. 574 2e-001
0	5. 037 8e-017

若数值解的误差 ξ_j 在一定的范数下满足不等式 $\|\xi_j\| \le C\|\xi_0\|, (j \ge 1)(\xi_0)$ 为初始层误差),则热传导方程的数值解是稳定收敛的,可以从表 1 中看出,数值解和

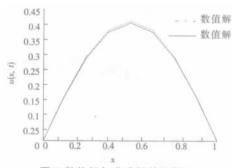


图 2 数值解与准确解的比较

精确解的误差非常小,在图 2 中几乎看不出数值解与精确解的差异。

5 结 语

本文利用 MATLAB 数学软件来求解热传导方程,通过区域转化的思想,把热传导方程离散化,再利用 MATLAB 软件对其进行求解,数值表明了方法的可行性和稳定性。

参考文献:

- [1]曹 钢,王桂珍,任晓荣.一维热传导方程的基本解[J].山东轻 工业学院学报, 2005,19(4):76-80.
- [2]万正苏,方春华,张再云.关于热传导方程有限差分区域分解并行算法精度的注记[J].湖南理工学院学报(自然科学版),2007,20(3):12-14.
- [3]StephenJ.Chapman.MATLAB 编程[M].邢树军,郑碧波,译. 北京:科学出版社,2008.
- [4]田 兵.用 MATLAB 解偏微分方程[J].阴山学刊, 2006,20(4): 12-13.
- [5]王 飞, 裴永祥.有限差分方法的 MATLAB 编程[J]. 新疆师范大学学报(自然科学版), 2003,22(4):21-27.
- [6]王宝红.热传导方程的可视化探讨[J].忻州师范学院学报, 2008,24(2):31-36.
- [7]李先枝.热传导方程差分解法的最佳网格[J].河南大学学报(自然科学版),2004,34(3):16-18.
- [8]赵德奎,刘 勇.MATLAB 在有限差分数值计算中的应用[J]. 四川理工学院学报,2005,18(4):61-64.
- [9]谢焕田,吴 艳.拉普拉斯有限差分法的 MATLAB 实现[J]. 四川理工学院学报,2008,21(3):1-2.
- [10]南京大学数学系计算数学专业.偏微分方程数值解法[M]. 北京:科学出版社,1979.

(下转第 36 页)

- tion of organic pollutants on nitrogen and fluoride co-doped TiO_2 photocatalyst [J]. Journal of Environmental Sciences, 2005, 17(1):76-80.
- [9]Ohno T, Akiyoshi M. Preparation of S-doped TiO₂ photocatalysts and their photocatalytic activities under visible light [J]. Applied Catalysis A: 2004, 265: 115-121.
- [10]Umebayashi T, Yamaki T. Analysis of electronic structures of 3d transition metal-doped TiO₂ based on band calculations [J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2002, 63: 1909-1920.
- [11]Balachandran U, Eror N G. Laser-induced vapourphase synthesis of titanium dioxide [J]. Journal of Solid State Chemistry, 1982, 42: 276-282.

- [12]Melendres C A. Raman spectroscopy of nanophase TiO₂ Source[J].Materials Research Bulletin,1989,4(5): 1246-1250.
- [13]Parker J C, Siegel R W. Raman microprobe study of nanophase TiO₂ and oxidation-induced spectral changes [J]. Materials Research Bulletin, 1990, 5(6): 1 246-1 249.
- [14] Arai T, Yanagida M, Konishi Y. Effficient complete oxidation of acetaldehyde in to CO₂ over CuBi2O4/WO₃ composite photocatalyst under visible and UV lignt irradiation [J]. Physical Chemistry, 2007, 111(21):7 574-7 577.

Preparation of TiO₂ Photocatalyst Coupling Doped with S and N Elements

YU Zhan-jiang, WANG Xiao-fang

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Xianyang Normal University, Xianyang, Shaanxi 712000, China)

Abstract: Using tetrabutyl titanate as Ti source, glacial acetic acid as a hydrolyzed inhibitor and DL-methionine as a small molecule dopant, a TiO₂ photocatalyst coupling doped with S and N nonmetallic elements was prepared via Sol-Gel method. XPS analysis shows that N²-incorporates into the TiO₂ crystal lattice and replaced partly O², and that the S⁴⁺ and S²⁻ also incorporate into the TiO₂ crystal lattice and substitute partial Ti⁴⁺ and O²⁻ respectively. Hence the formation of S and N coupling-doping on TiO₂ gets achieved. XRD diffraction indicates the S and N coupling-doping doped TiO₂ photocatalysts all exist in the phase of anatase, which demonstrate that S and N coupling-doping features stronger effect on restraining the TiO₂ crystal phase transformation from anatase to rutile. Optical property analysis presents that the S and N coupling-doping has effect not only on extending absorption edge of photocatalyst to visible light region but on keeping the ultraviolet light absorption nearly unchanged.

Key words: photocatalyst; coupling-doping; titanium dioxide; Sol-Gel

(上接第 29 页)

Heat Conduction Equation Finite Difference Method to Achieve the MATLAB

SHI Ce

(School of Science, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an, Shaanxi 710055, China)

Abstract:For bounded homogeneous heat conduction equation of the mixed problem, separation of variables method used is often very complex. In order to better understand the heat conduction equation, it is useful to apply the MATLAB software equation by images expression. Though which transforms through the region, which is programming using MATLAB heat conduction equation of a certain region of the finite difference method, and numerical method demonstrates the feasibility and stability.

Key words: heat conduction equation; finite difference; MATLAB