物理建模与仿真基础笔记

1. 输运方程 (Transport Equation)

核心概念: 输运方程是描述某个物理量 Φ 如何在空间中输运（移动）和变化的通用数学模型。

通用形式:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j^2} + F$$

其中 Φ 可以代表:

- 热量/温度 (T)
- 物质浓度 (C)
- 动量 ($\rho \mathbf{u}$)
- ... 等物理属性 (Physical properties)

方程各项物理解释:

1. $\frac{\partial \Phi}{\partial t}$ **: 存储项 (Storage / 蓄積 xù jī)**
   - 表示在一个固定点（或微小控制体积内），物理量 Φ **随时间的变化率**。
   - 描述 Φ 在该点随时间的积累（增加）或损耗（减少）。
2. $u_j \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}$ **: 平流项 (Advection / 平流 píng liú)** (有时也称 Convection 对流)
   - 表示物理量 Φ **被主体流动"带走"或"吹走"** 的效应。
   - $\mathbf{u}$ (分量为 u_j) 是流体的**速度场**。
   - $\frac{\partial \Phi}{\partial x_j}$ 是 Φ 在空间上的**梯度**（变化情况）。
   - 这一项描述的是 Φ **随着平均流速 $\mathbf{u}$** 发生的输运。
   - *注:* 这里使用了爱因斯坦求和约定，重复下标 j (取 1, 2, 3) 表示对所有空间维度求和：$u_j \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} = u_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial \Phi}{\partial x_2} + u_3 \frac{\partial \Phi}{\partial x_3} = \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi$。
3. $D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j^2}$ **: 扩散项 (Diffusion / 擴散 kuò sàn)**
   - 表示物理量 Φ **自身"扩散"开** 的效应。
   - 这是由分子随机运动（或湍流等效的随机运动）引起的，使得 Φ **从浓度高处向浓度低处**自发传递的趋势。
   - D 是**扩散系数 (Diffusivity)**，单位通常为 $[\mathrm{m}^2/\mathrm{s}]$。它衡量 Φ 扩散快慢的程度，D 越大，扩散越快。

- $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j^2}$ 是 Φ 的**拉普拉斯算子** ($\nabla^2 \Phi$)，表示 Φ 场分布的“弯曲程度”。$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j^2} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_3^2}$。

4. F **: 源/汇项 (Source/Sink Term)**
   - 表示是否有外部因素在**产生**（源, $F > 0$）或**消耗**（汇, $F < 0$）物理量 Φ。
   - 例如：化学反应产生/消耗某物质，加热器产生热量。

重要前提假设:

- **连续介质假设 (Continuum Assumption / 連續體假設):** 将物质（如流体、固体）视为连续、充满空间的整体，忽略其微观的、不连续的分子结构。这使得我们可以使用微积分（导数）来描述其宏观性质（如密度、速度、温度）的变化。

平流-扩散方程 (Advection-Diffusion Equation):

- 当输运过程主要由**平流**和**扩散**控制时（即方程包含这两项），该方程常被称为平流-扩散方程。这是许多物理现象（如污染物扩散、热传导伴随流动）的基础模型。

符号定义:

- t: 时间 (time) [s]
- x_j: 空间坐标/位移 (space, displacement) [m] ($j = 1, 2, 3$ 代表 x, y, z 方向)
- u_j: 速度分量 (velocity component) [m/s] ($j = 1, 2, 3$)
- D: 扩散系数 (Diffusivity) [m²/s]
- Φ: 所研究的物理量 (其单位取决于具体物理量)
- F: 源/汇项 (单位为 Φ 的单位 / 时间)

2. 示例：一维热传导方程 (1D Heat Equation)

考虑一个一维金属棒，一端加热 (温度 T_H)，另一端维持低温 (温度 T_C)。

- **物理量:** $\Phi = T$ (温度)
- **简化条件:**
  - **无平流 (No Advection):** 金属棒是固体，没有宏观流动带走热量，$\mathbf{u} = 0$。因此平流项 $u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = 0$。
  - **无内部源/汇 (No internal Source/Sink):** 假设棒内部没有化学反应或其他产热/吸热现象，$F = 0$。热源/冷源是施加在边界上的条件。
  - **一维问题:** 只考虑沿棒长度方向 (x) 的热量传递。

输运方程简化:

将上述条件代入通用输运方程：

$$\frac{\partial T}{\partial t} + 0 = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + 0$$

得到**一维热传导方程 (或扩散方程):**

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

- 这里的 D 是**热扩散系数 (Thermal Diffusivity)**。
- **物理解释:** 棒内某一点的温度随时间的变化率 $\frac{\partial T}{\partial t}$ 正比于该点温度分布曲线的弯曲程度 (二阶导数 $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$)。热量从温度“凸”处流向“凹”处，使温度分布趋于平缓（直线）。

3. 张量/向量记号与爱因斯坦求和约定

基础: 在处理多维空间（如 3D 空间中的流体运动）时，使用下标和求和约定可以大大简化数学表达式。

- **坐标:** x_1, x_2, x_3 (或 x, y, z)
- **向量分量:** u_1, u_2, u_3 (或 u, v, w for 速度 $\mathbf{u}$)

爱因斯坦求和约定 (Einstein's summation rule):

- 在一个乘积项中，如果某个下标（字母）**出现两次**，则表示对该下标所有可能的取值（通常是 1, 2, 3）进行求和。
- 例如: $x_i y_i$ 意味着 $\sum_{i=1}^{3} x_i y_i = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3$ (向量点积 $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$)。

哑标 (Dummy index) 与 自由标 (Free index):

- **哑标:** 在求和约定中被加总的下标（出现两次）。例如 $x_i y_i$ 中的 i。哑标可以用任何其他未使用的字母替换而不改变表达式的值 ($x_k y_k$ 也是一样的)。
- **自由标:** 在表达式中只出现一次的下标。例如 $A_i = B_j C_{ij}$ 中的 i。方程两边自由标必须一致。

应用实例：散度 (Divergence)

- 向量场 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ 的散度定义为 $\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}$。
- 使用爱因斯坦求和约定，可以简洁地写为:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad \text{或} \quad \partial_i u_i$$

- 这里的 i 是**哑标**，表示对 $i = 1, 2, 3$ 求和。

- **简化记号:** ∂_i 表示对第 i 个坐标 x_i 求偏导数，即 $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}$。所以 $(\nabla)_i = \partial_i$。

置换 (Permutations) 与 Levi-Civita 符号 (用于叉积等):

- **偶排列 (Even permutation):** 从 123 通过偶数次相邻元素交换得到的排列 (如 $123, 231, 312$)。
- **奇排列 (Odd permutation):** 从 123 通过奇数次相邻元素交换得到的排列 (如 $132, 213, 321$)。
- Levi-Civita 符号 ϵ_{ijk}:
    - $\epsilon_{ijk} = +1$ 如果 (i, j, k) 是 $(1, 2, 3)$ 的偶排列。
    - $\epsilon_{ijk} = -1$ 如果 (i, j, k) 是 $(1, 2, 3)$ 的奇排列。
    - $\epsilon_{ijk} = 0$ 如果任意两个下标相同。
- **应用：叉积 (Cross Product)**
  向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ 的叉积 $\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$ 的第 i 个分量 c_i 可以表示为：

$$c_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k$$

  (这里 j 和 k 都是哑标，需要对它们求和)。

4. 连续性方程 (Continuity Equation) - 质量守恒

基础原理: 质量守恒定律 - 在一个封闭系统或控制体积内，质量不会无缘无故地产生或消失。

推导思路 (以控制体积为例):

1. **控制体积 (Control Volume):** 考虑空间中一个固定的微小立方体区域 $\Omega = \Delta x \Delta y \Delta z$。
2. **质量:** 体积 Ω 内流体的总质量约为 $m = \rho \Omega$，其中 ρ 是该处的流体密度。
3. **质量变化率 (储存项):** 在一小段时间 Δt 内，控制体积内质量的变化量 T_s：

$$T_s \approx \Delta(\rho \Omega) = (\rho(t + \Delta t) - \rho(t))\Omega \approx \frac{\partial \rho}{\partial t} \Omega \Delta t$$

   （假设 Ω 固定，只有 ρ 随时间变化）。
    - **单位时间质量变化率 (储存速率):** $\frac{T_s}{\Delta t} \approx \frac{\partial \rho}{\partial t} \Omega$
4. **通过边界的质量流 (流入流出项):** 考虑流体流过控制体积边界。
    - **质量通量 (Mass flux):** 单位时间通过单位面积的质量，其法向分量为 $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$。
    - **净流入量 (T_{IO}):** 在 Δt 时间内，所有流入边界的质量减去所有流出边界的质量。
        - 例如，只考虑 x 方向：
            - 流入 x 面 ($\Delta y \Delta z$) 的质量：$\approx (\rho u_x)|_x \Delta y \Delta z \Delta t$
            - 流出 $x + \Delta x$ 面 ($\Delta y \Delta z$) 的质量：$\approx (\rho u_x)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \Delta t$

    - x 方向净流入： $\approx [(\rho u_x)|_x - (\rho u_x)|_{x+\Delta x}]\Delta y\Delta z\Delta t \approx -\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x}\Delta x\Delta y\Delta z\Delta t = -\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x}\Omega\Delta t$
  - 推广到三维，总净流入质量为：

$$T_{IO} \approx -\left(\frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z}\right)\Omega\Delta t = -(\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}))\Omega\Delta t$$

  - **单位时间净流入速率:** $\frac{T_{IO}}{\Delta t} \approx -(\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}))\Omega$
5. **质量守恒:** 控制体积内质量的增加率必须等于净流入质量的速率。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}\Omega = -(\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}))\Omega$$

6. **连续性方程 (微分形式):** 消去 Ω，得到流体动力学中基本的**连续性方程**:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = 0$$

   或使用爱因斯坦求和约定：

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad 或 \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \partial_i(\rho u_i) = 0$$

物理解释:

- $\frac{\partial\rho}{\partial t}$: 某点密度的**时间变化率 (局部变化)**。
- $\nabla\cdot(\rho\mathbf{u})$: **质量通量 ($\rho\mathbf{u}$) 的散度**，表示单位体积内质量的净流出率（流体从该点“发散”出去的程度）。
- 方程表示：某点密度的增加率等于该点质量通量的负散度（即净流入率）。如果一个地方流体净流出 ($\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) > 0$)，那么该处的密度就会随时间减小 ($\frac{\partial\rho}{\partial t} < 0$)。

不可压缩流体特例:

- 如果流体密度 ρ 是常数（不随时间或空间变化，称为不可压缩流体），则 $\frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$，且 ρ 可以从散度中提出来：

$$\rho(\nabla\cdot\mathbf{u}) = 0 \implies \nabla\cdot\mathbf{u} = 0$$

  即：

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad 或 \quad \partial_i u_i = 0$$

这表示不可压缩流体的速度场是**无散度**的（流入等于流出）。