



中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

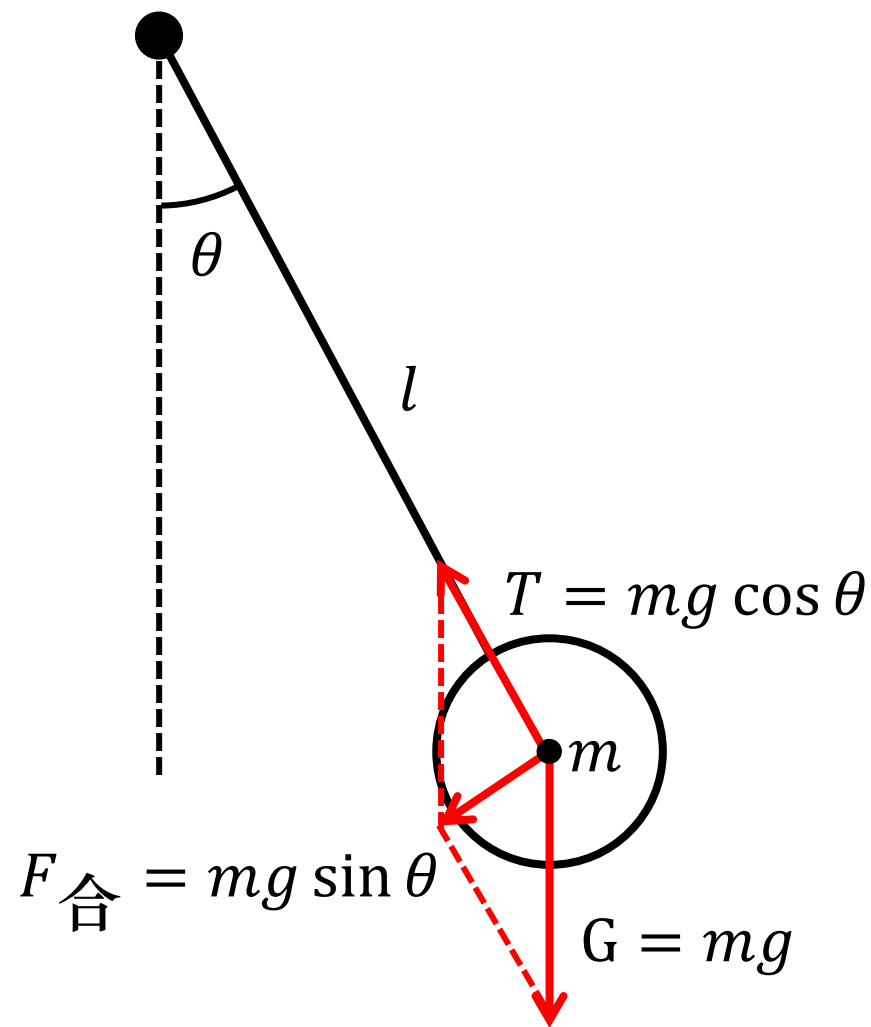
计算模拟方法导论 与 COMSOL Multiphysics®应用

Torchwood物理学社 陈乐

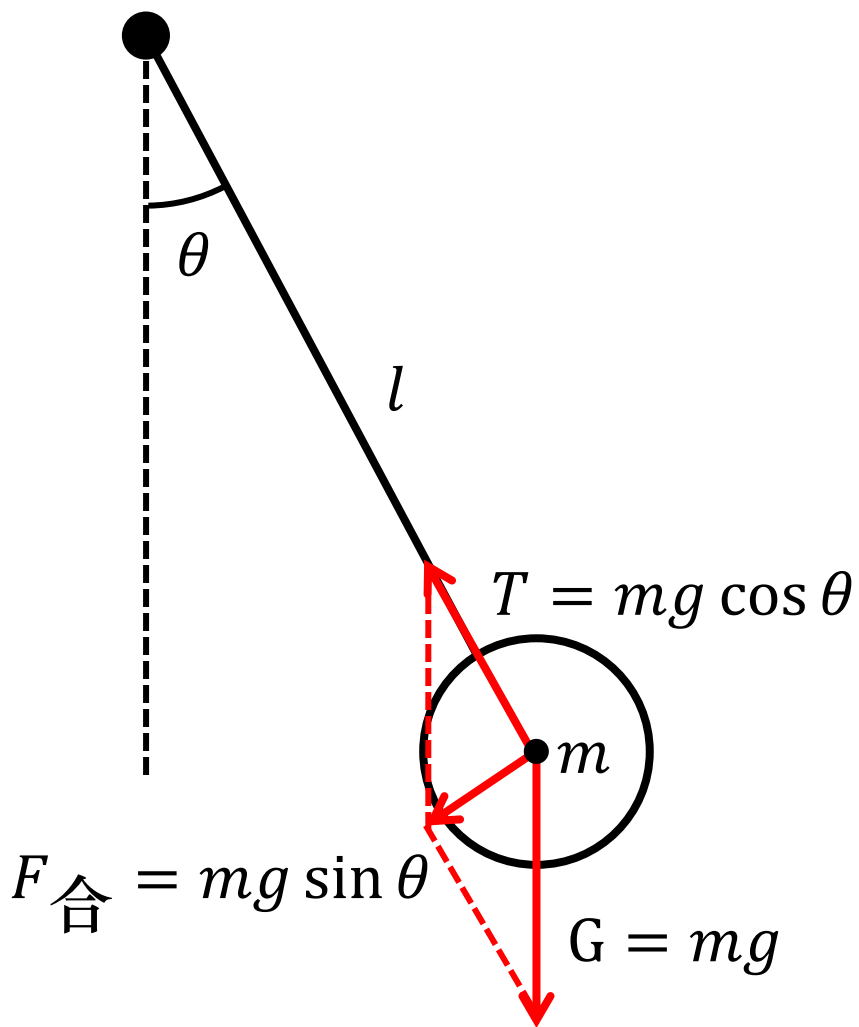
chenle9@mail2.sysu.edu.cn

2023-11-04

从一个单摆开始



从一个单摆开始



由极坐标系下的牛顿第二定律有：

$$\tau = I\alpha$$

由受力分析有：

$$\tau = F_{\text{合}} \times l = mgl \sin \theta$$

$$I = ml^2$$

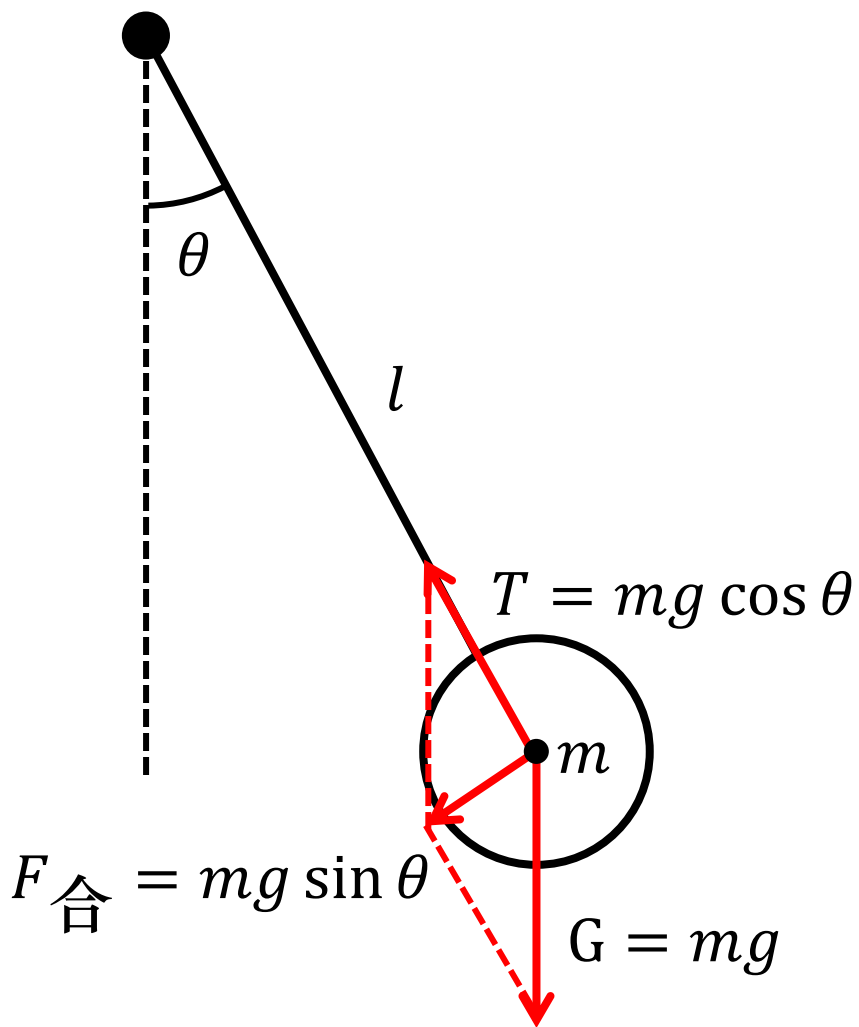
单摆的动力学方程如下：

$$\alpha = -\frac{g}{l} \sin \theta$$

即

$$\frac{d^2 \theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0$$

从一个单摆开始



$$\frac{d^2 \theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0$$

由小角近似 $\sin \theta \approx \theta$ 化为:

$$\frac{d^2 \theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \theta = 0$$

其解析解为:

$$\theta(t) = \theta_0 \cos \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t \right) + \frac{\omega_0}{\sqrt{g/l}} \sin \left(\sqrt{\frac{g}{l}} t \right)$$

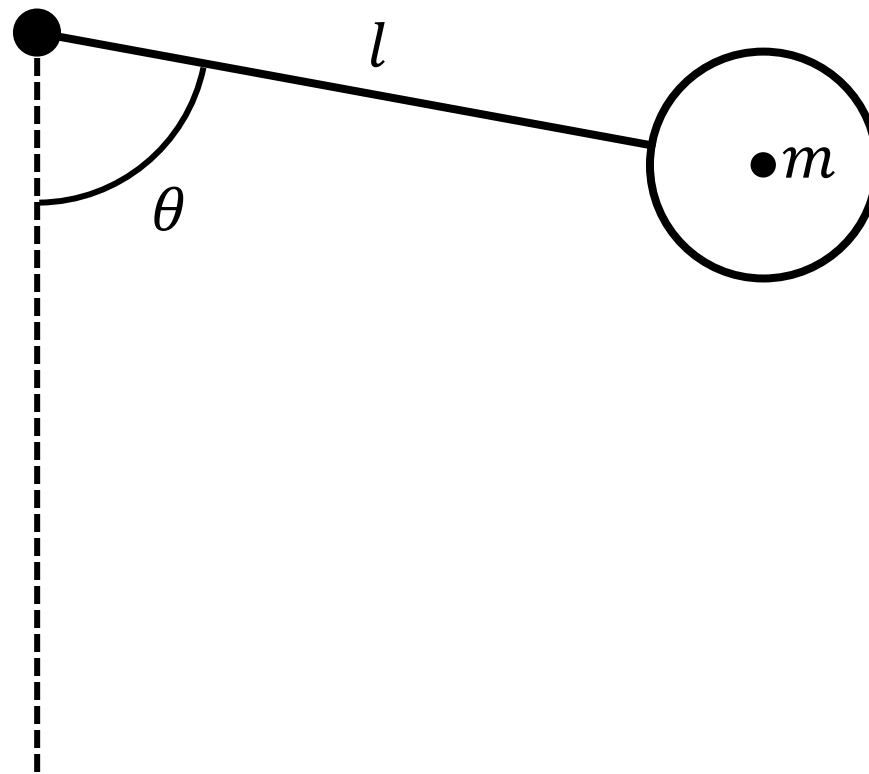
经典周期:

$$T = 2\pi \sqrt{l/g}$$

从一个单摆开始

若小角近似 $\sin \theta \approx \theta$ 不再适用

我们怎么求解 $\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0$?



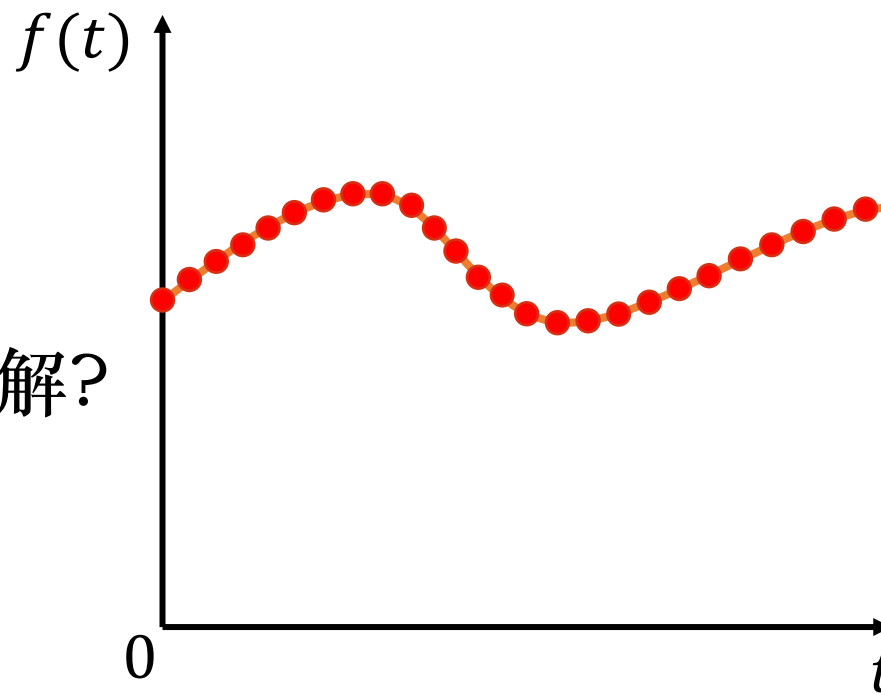
从一个单摆开始

假设有一个函数 $f(t)$

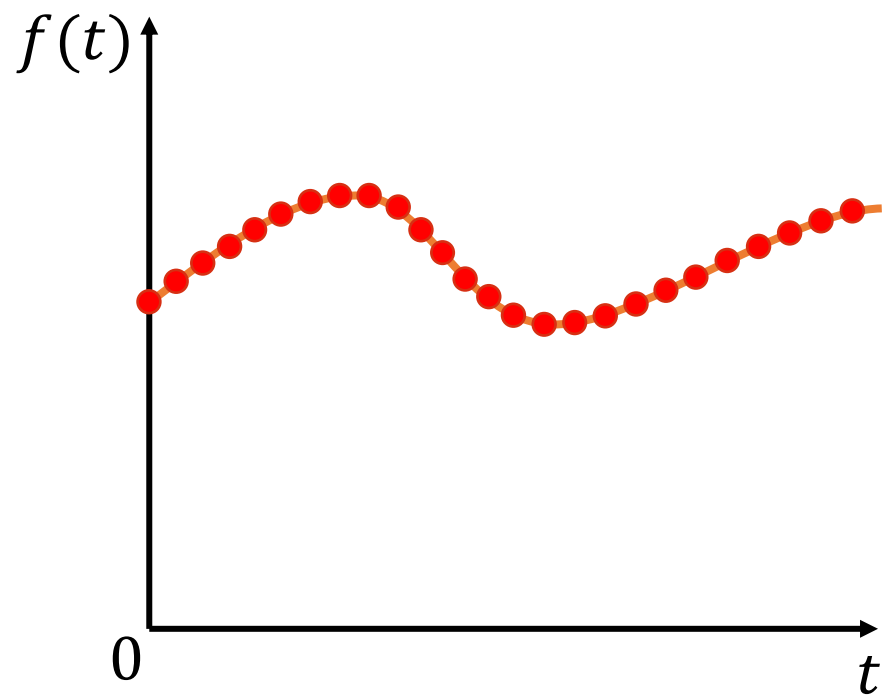
我们知道 $f(0)$

能否通过步进 t 的方法求解数值解？

——微分方程初值问题数值解



微分方程初值问题数值解



如何离散化时间?

将 $f(t)$ 在 $t = t_0$ 处做泰勒展开:

$$\begin{aligned} f(t) &= f(t_0) + f'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2!}f''(t_0)(t - t_0)^2 \\ &+ \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(t_0)(t - t_0)^n + \cdots \end{aligned}$$

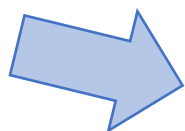
微分方程初值问题数值解



将 $f(t_i)$ 在 $t = t_{i-1}$ 处做泰勒展开:

$$\begin{aligned} f(t_i) &= f(t_{i-1} + \Delta t) \\ &= f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})(\Delta t) \\ &\quad + \frac{1}{2!} f''(t_i)(\Delta t)^2 + \dots \\ &\quad + \frac{1}{n!} f^{(n)}(t_i)(-\Delta t)^n + \dots \end{aligned}$$

(The entire Taylor expansion above is crossed out with a red diagonal line.)



对于一阶欧拉方法:

$$f(t_i) = f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})\Delta t$$

微分方程初值问题数值解



前进欧拉方法（显式）：

$$f(t_i) = f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})\Delta t$$

后退欧拉方法（隐式）：

$$f(t_i) = f(t_{i-1}) + f'(t_i)\Delta t$$

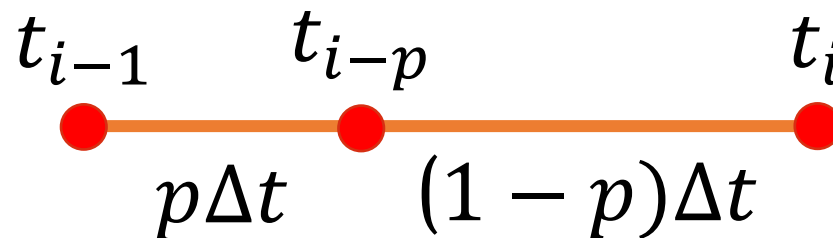
迭代求解：

$$f(t_{i,1}) = f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})\Delta t$$

$$f(t_{i,2}) = f(t_{i-1}) + f'(t_{i,1})\Delta t$$

...

微分方程初值问题数值解



在 (t_{i-1}, t_i) 取一点 t_{i-p}

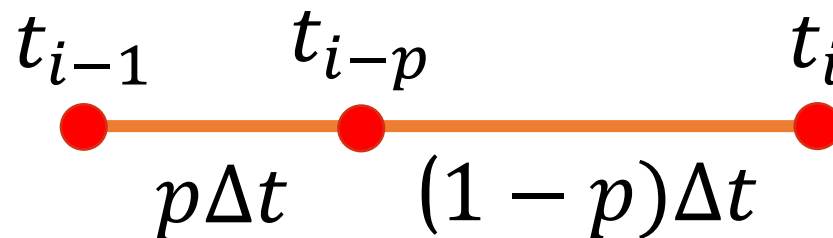
对步进取加权，加权系数为 λ ：

$$f(t_i) = f(t_{i-1}) + \Delta t[(1 - \lambda)K_1 + \lambda K_2]$$

$K_1 = f'(t_{i-1})$ 为 (t_{i-1}, t_{i-p}) 的斜率

$K_2 = f'(t_{i-p})$ 为 (t_{i-p}, t_i) 的斜率

微分方程初值问题数值解

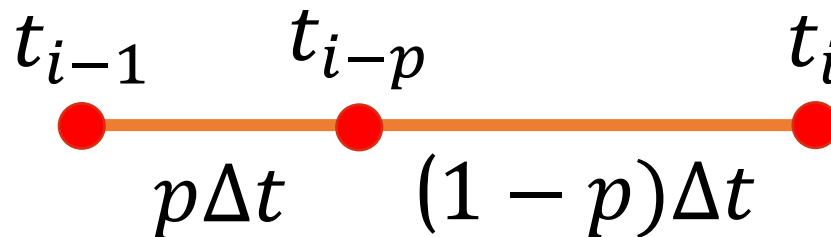


将 $f'(t_{i-p})$ 在 $t = t_{i-1}$ 处做泰勒展开:

$$\begin{aligned} f'(t_{i-p}) &= f'(t_{i-1} + p\Delta t) \\ &= f'(t_{i-1}) + f''(t_{i-1})(p\Delta t) + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

$$K_2 = f'(t_{i-p}) = f'(t_{i-1}) + f''(t_{i-1})(p\Delta t) + O(\Delta t^2)$$

微分方程初值问题数值解



将 $f(t_i)$ 在 $t = t_{i-1}$ 处做泰勒展开:

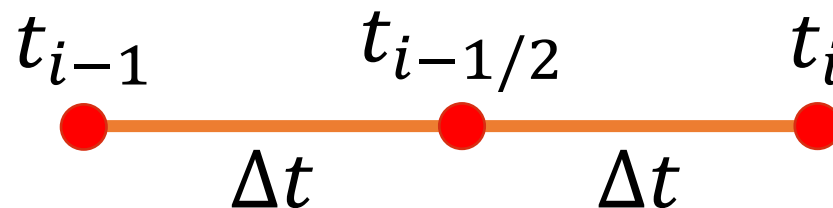
$$\begin{aligned}
 f(t_i) &= f(t_{i-1} + \Delta t) \\
 &= f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})(\Delta t) \\
 &\quad + \frac{1}{2!} f''(t_{i-1})(\Delta t)^2 + O(t^3)
 \end{aligned}$$

$$\lambda p = \frac{1}{2}$$

将 K_1 和 K_2 代入

$$\begin{aligned}
 f(t_i) &= f(t_{i-1}) + \Delta t[(1-\lambda)K_1 + \lambda K_2] \\
 f(t_i) &= f(t_{i-1}) + \Delta t(1-\lambda) f'(t_{i-1}) + \\
 &\quad \Delta t \lambda f'(t_{i-1}) + \Delta t \lambda f''(t_{i-1})(p\Delta t) + O(t^3) \\
 &= f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})(\Delta t) + \\
 &\quad \lambda p f''(t_{i-1})(\Delta t)^2 + O(t^3)
 \end{aligned}$$

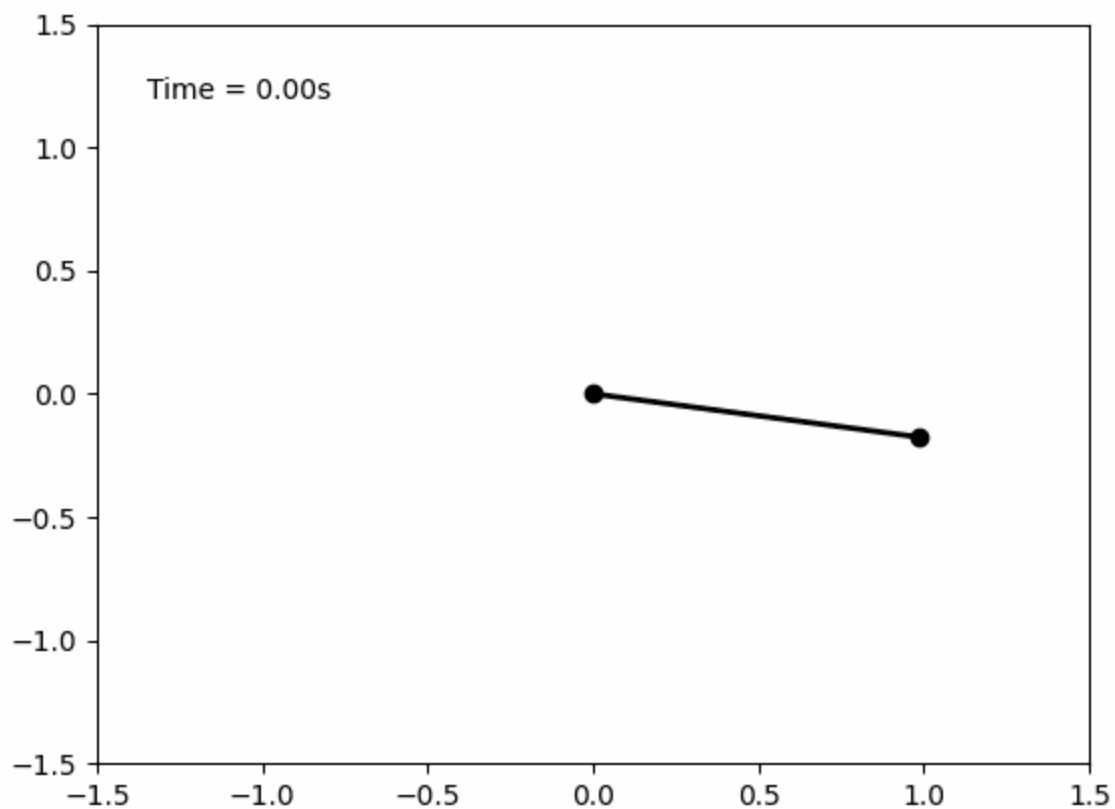
微分方程初值问题数值解



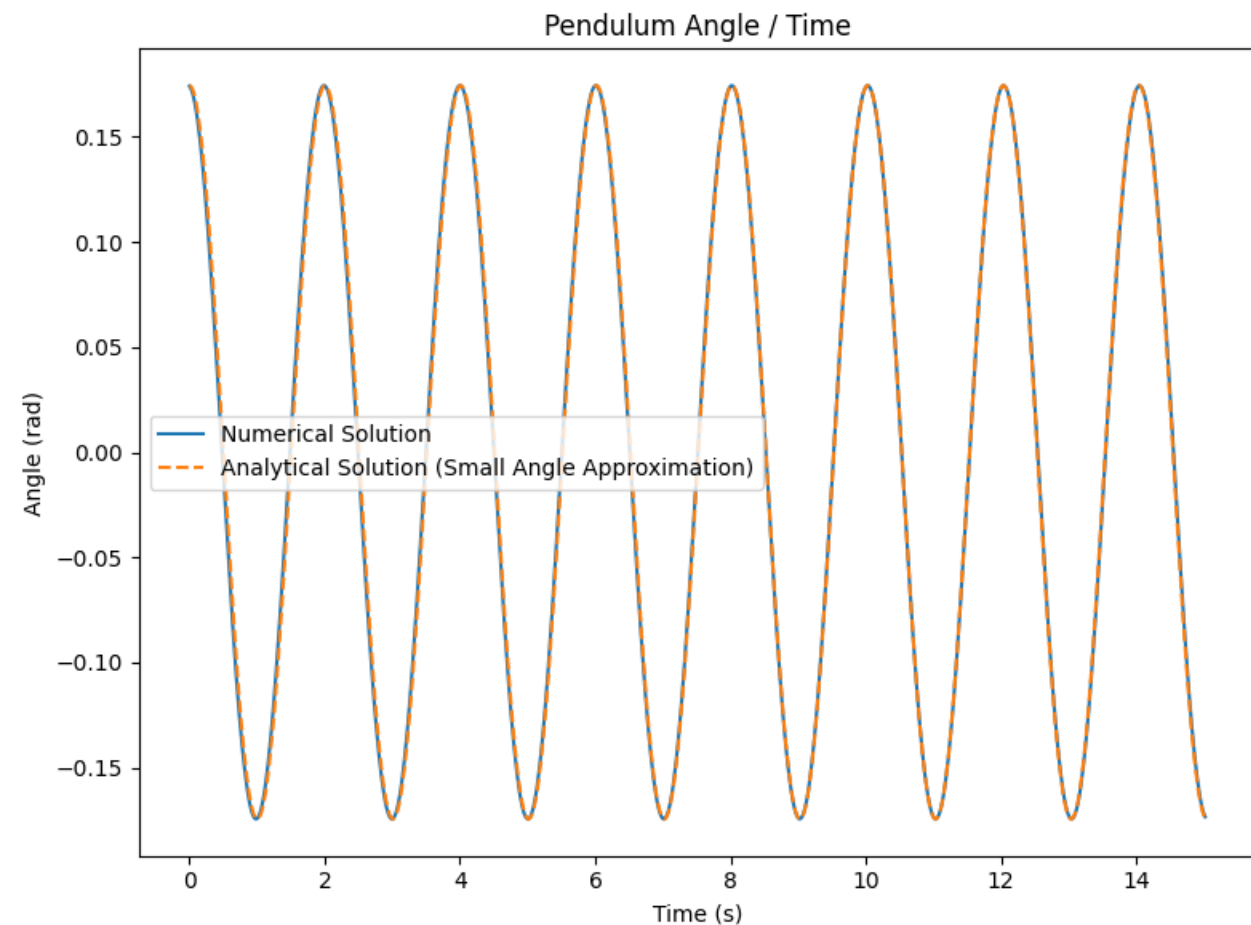
二阶龙格-库塔方法（中点格式）：

$$\lambda = 1, \quad p = \frac{1}{2}$$
$$f(t_i) = f(t_{i-1}) + \Delta t K_2$$
$$K_2 = f'(t_{i-1/2})$$

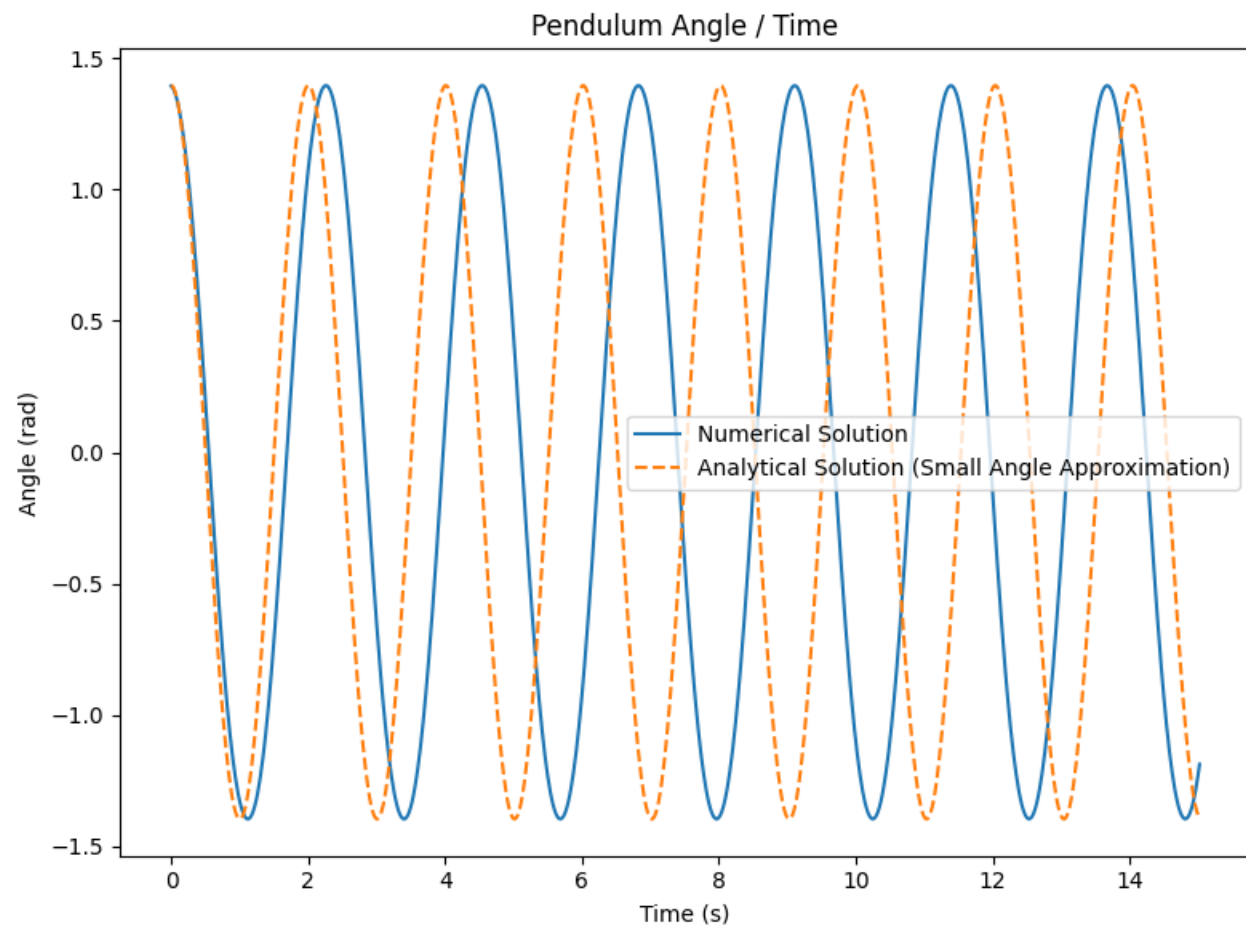
回到单摆



回到单摆



$$\theta = 10^\circ$$



$$\theta = 80^\circ$$

回到单摆

微分方程初值问题数值解：物理过程与时间有关

考虑方程（Mooney-Rivlin双参数超弹性模型）：

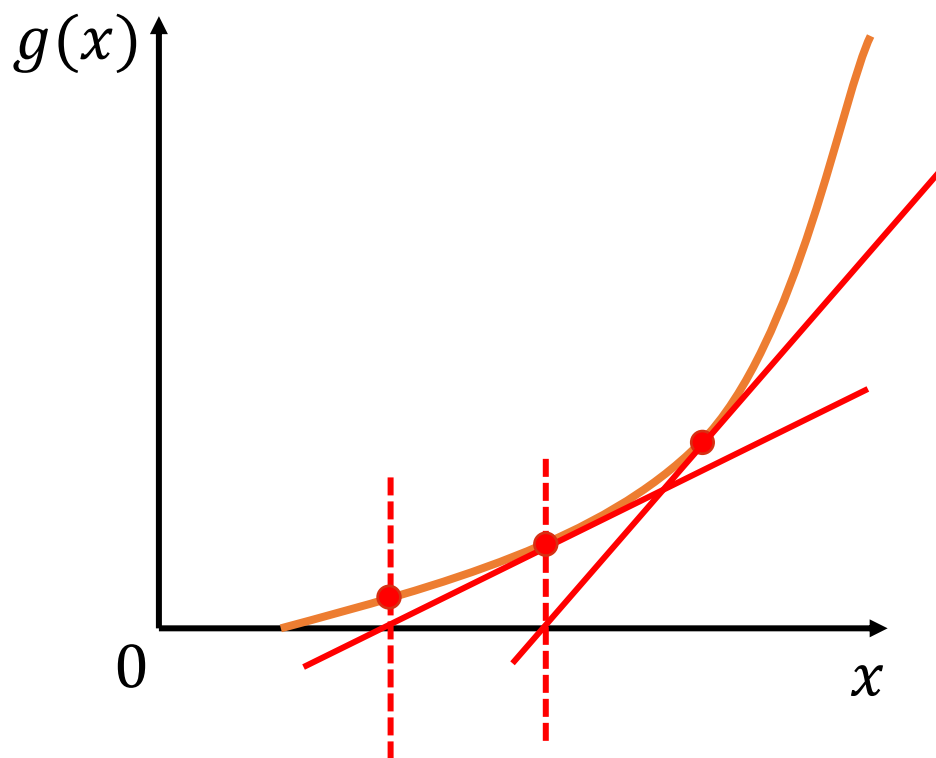
$$\sigma = 2C_{10} \left(\lambda - \frac{1}{\lambda^2} \right) + 2C_{01} \left(\lambda - \frac{1}{\lambda} \right)$$

- σ 是应力
- λ 是拉伸比，即拉伸后的长度与原始长度的比值
- C_{10} 和 C_{01} 是Mooney-Rivlin模型的参数

非线性方程数值解：物理过程与时间无关

非线性方程数值解

考虑方程 $f(x) = m$ ，化为 $g(x) = f(x) - m = 0$



牛顿迭代法：

$$x_{n+1} = x_n - \frac{g(x_n)}{g'(x_n)}$$

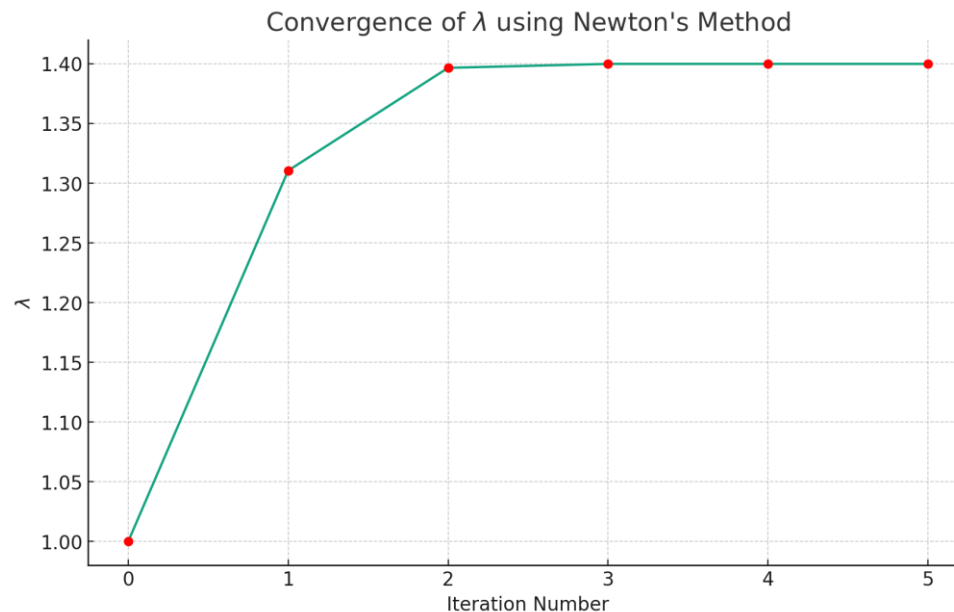
橡皮筋拉伸的数值解

考虑方程（Mooney-Rivlin双参数超弹性模型）：

$$\sigma = 2C_{10} \left(\lambda - \frac{1}{\lambda^2} \right) + 2C_{01} \left(\lambda - \frac{1}{\lambda} \right)$$

取 $C_{10} = 0.187MPa$, $C_{01} = 0.122MPa$, $\sigma = 0.5MPa$

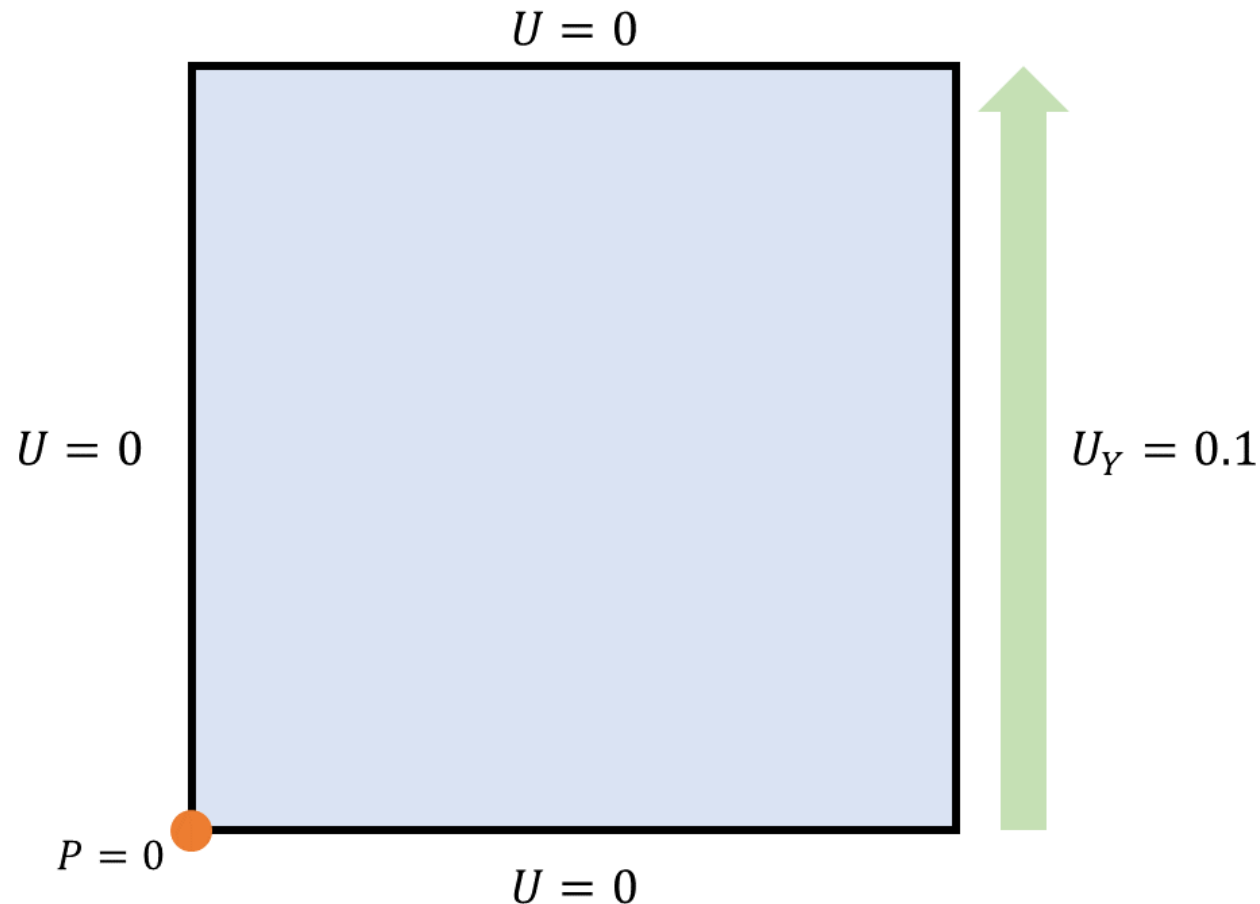
最终解得 $\lambda \approx 1.40$



更加现实的物理问题

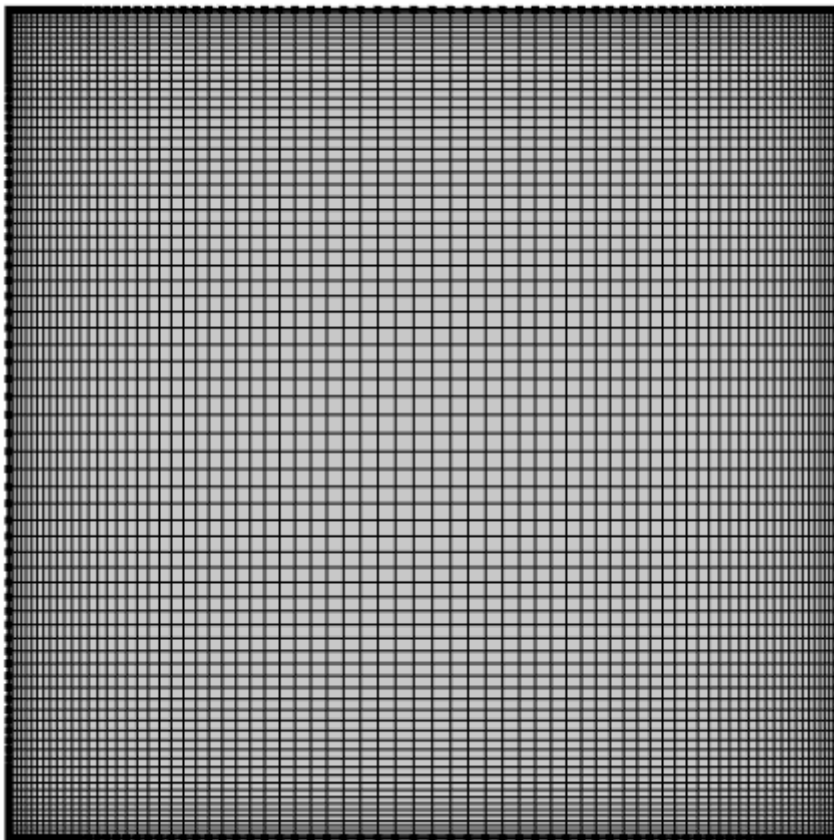
欧拉方程:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \rho \vec{F} - \nabla p$$

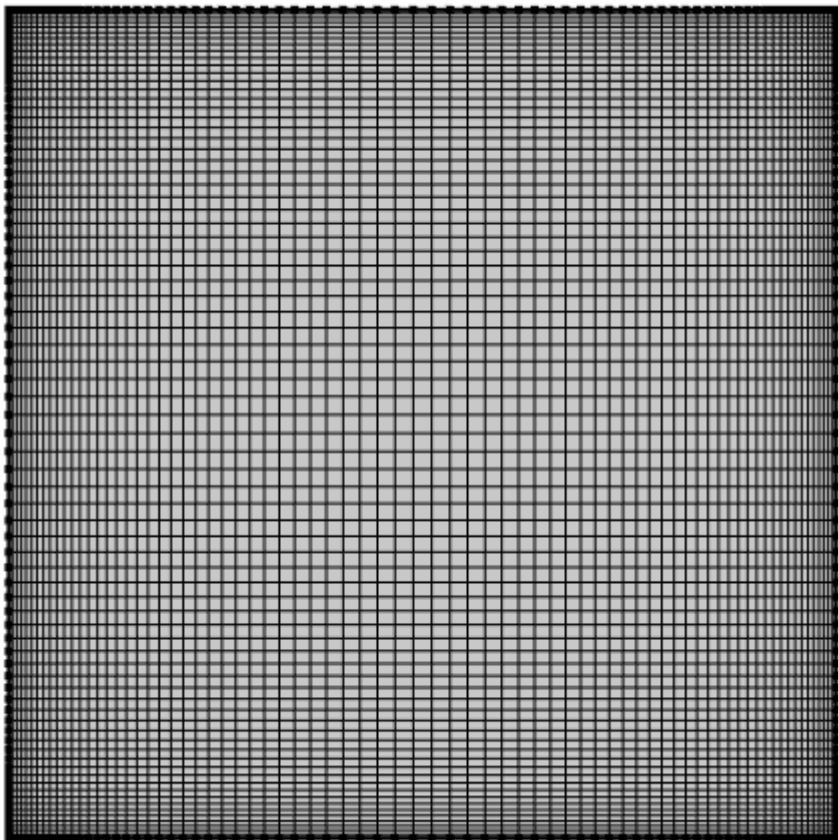


顶盖驱动空腔问题

更加现实的物理问题



更加现实的物理问题



①有限差分

$$f(x_i, y) = f(x_{i-1}, y) + f'_x(x_{i-1}, y)h$$

缺点：要求规则网格，通用性弱

②有限元

使用函数逼近方法

类似傅里叶变换：

$$f(x) \approx c_0 \cdot \varphi_0 + c_1 \cdot \varphi_1 + \cdots$$

φ 为基函数， c 为系数

更加现实的物理问题

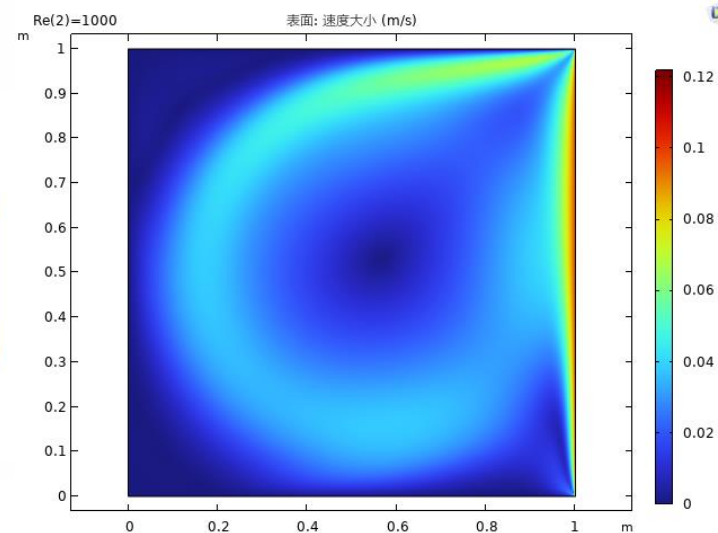
将节点 A、B、C 的平衡关系写成一个方程组，有

类似：

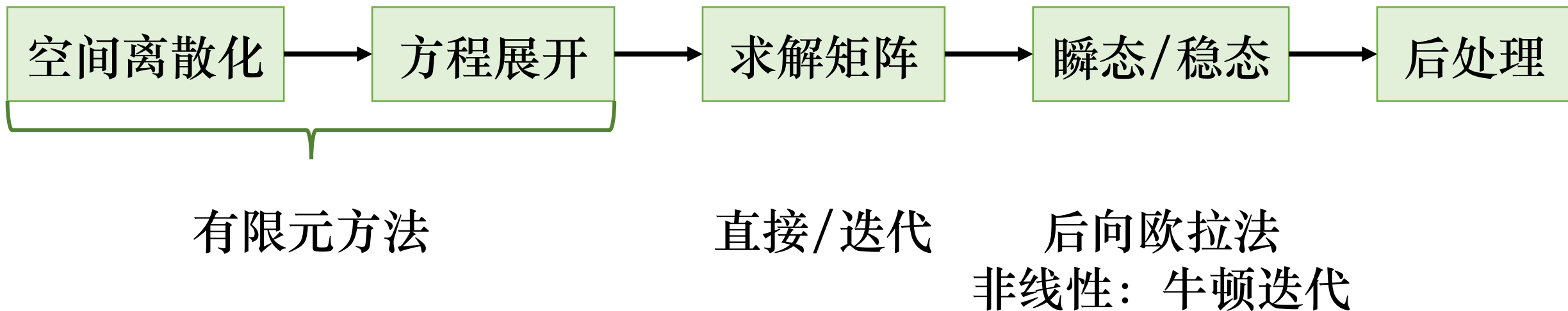
$$\left. \begin{aligned} -\tilde{P}_A - \left(\frac{E_1 A_1}{l_1} \right) u_A + \left(\frac{E_1 A_1}{l_1} \right) u_B + 0 &= 0 \\ 0 + \left(\frac{E_1 A_1}{l_1} \right) u_A - \left(\frac{E_1 A_1}{l_1} + \frac{E_2 A_2}{l_2} \right) u_B + \left(\frac{E_2 A_2}{l_2} \right) u_C &= 0 \\ P_C - 0 + \left(\frac{E_2 A_2}{l_2} \right) u_B - \left(\frac{E_2 A_2}{l_2} \right) u_C &= 0 \end{aligned} \right\}$$

写成矩阵形式，有

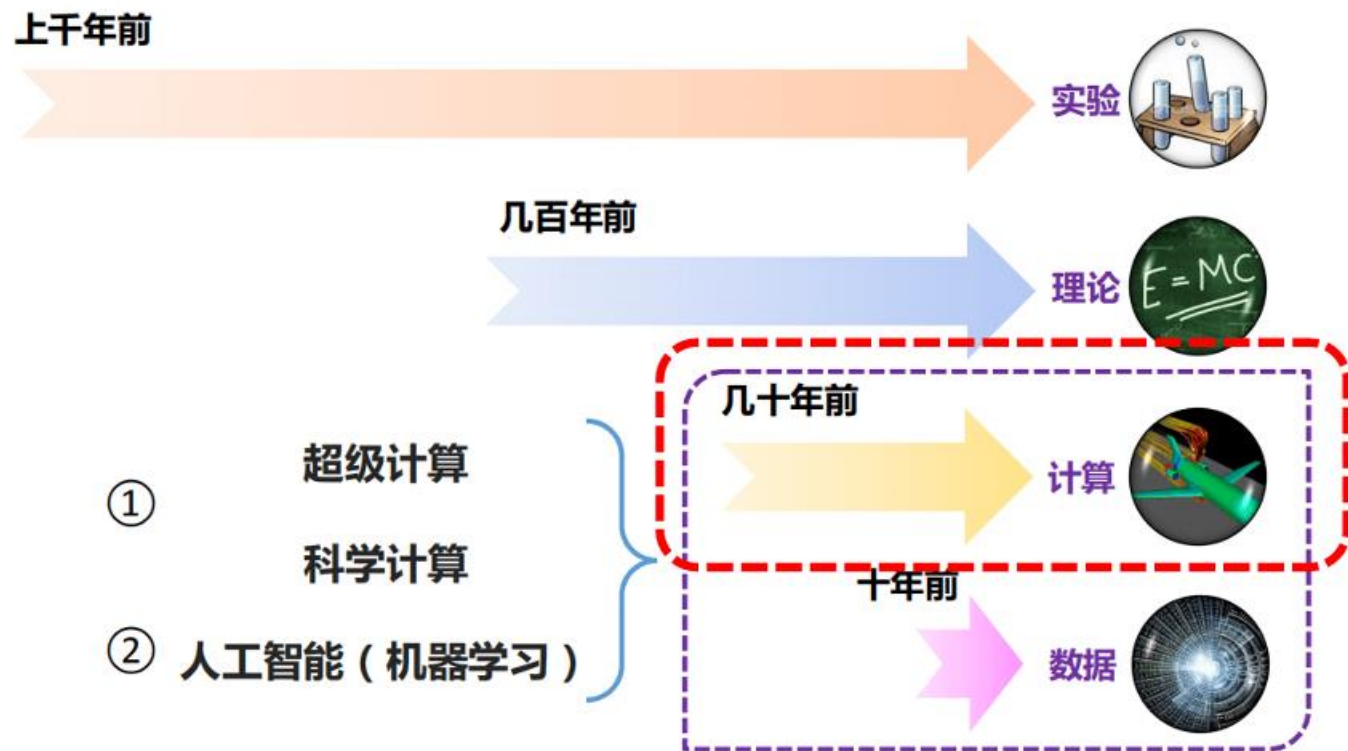
$$\begin{bmatrix} -\tilde{P}_A \\ 0 \\ P_C \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{E_1 A_1}{l_1} & -\frac{E_1 A_1}{l_1} & 0 \\ -\frac{E_1 A_1}{l_1} & \frac{E_1 A_1}{l_1} + \frac{E_2 A_2}{l_2} & -\frac{E_2 A_2}{l_2} \\ 0 & -\frac{E_2 A_2}{l_2} & \frac{E_2 A_2}{l_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \\ u_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$



小总结

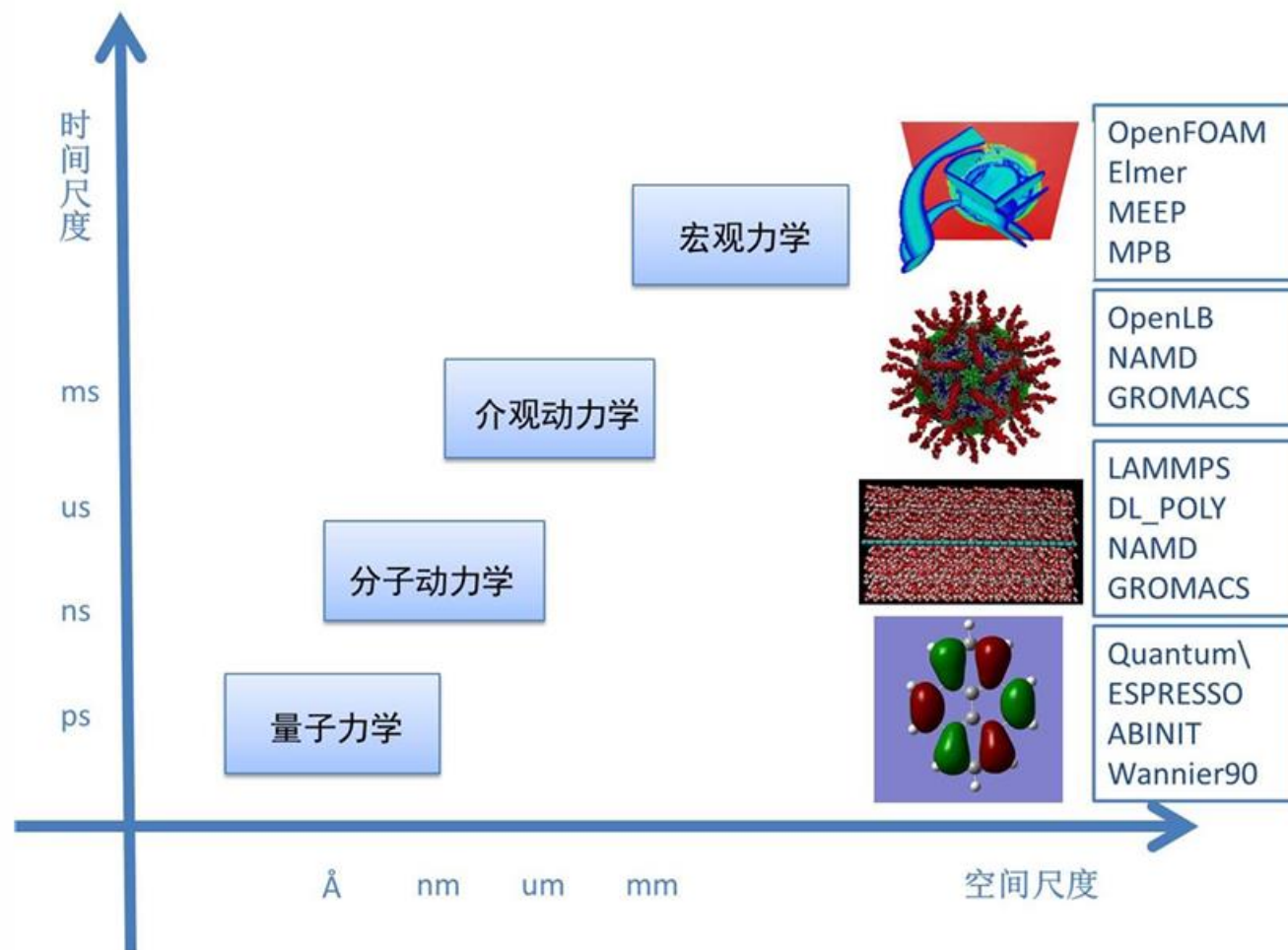


现代计算机模拟方法导论



Jim Gray, *The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery*, 2009

现代计算机模拟方法导论



计算机模拟是一种“计算实验”

- ① 建模与边界问题：建模为三维/二维/二维轴对称？
建模的范围多大？
- ② 材料与参数问题：材料的物理参数从哪里来？
- ③ 物理模型的准确性和适用范围
- ④ 有限元的基础——网格划分
- ⑤ 求解方程——边界条件
- ⑥ 验证仿真的正确性——结果与和实验的对照



如何学习计算机模拟

- ① 相关课程：《数值计算(数值分析)》、《计算物理》
- ② 实践的第一步：商业软件
- ③ 深入数学/算法：开源软件/代码

什么是COMSOL Multiphysics®

**使用 COMSOL 多物理场仿真软件
模拟真实场景下的物理现象
设计和优化实际工程问题**

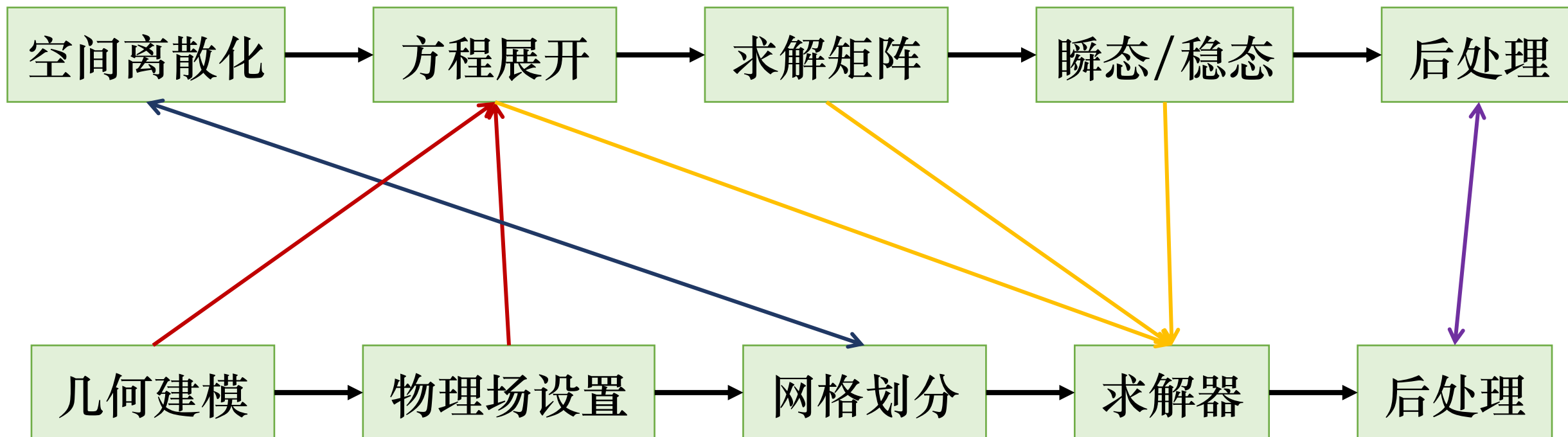
- ✓ 基于先进数值方法的通用仿真软件
- ✓ 支持单一物理场及多物理场耦合建模
- ✓ 同一界面中实现完整建模流程 - 从几何模型构建到结果后处理
- ✓ 提供便捷易用的仿真 App 创建、部署工具

本质：有限元方法商业软件

优点：高度自由，易上手的交互，非常充足的案例库

缺点：闭源，方法有限，计算效率较低

COMSOL Multiphysics®的一般流程



COMSOL Multiphysics®的一般流程



选择空间维度



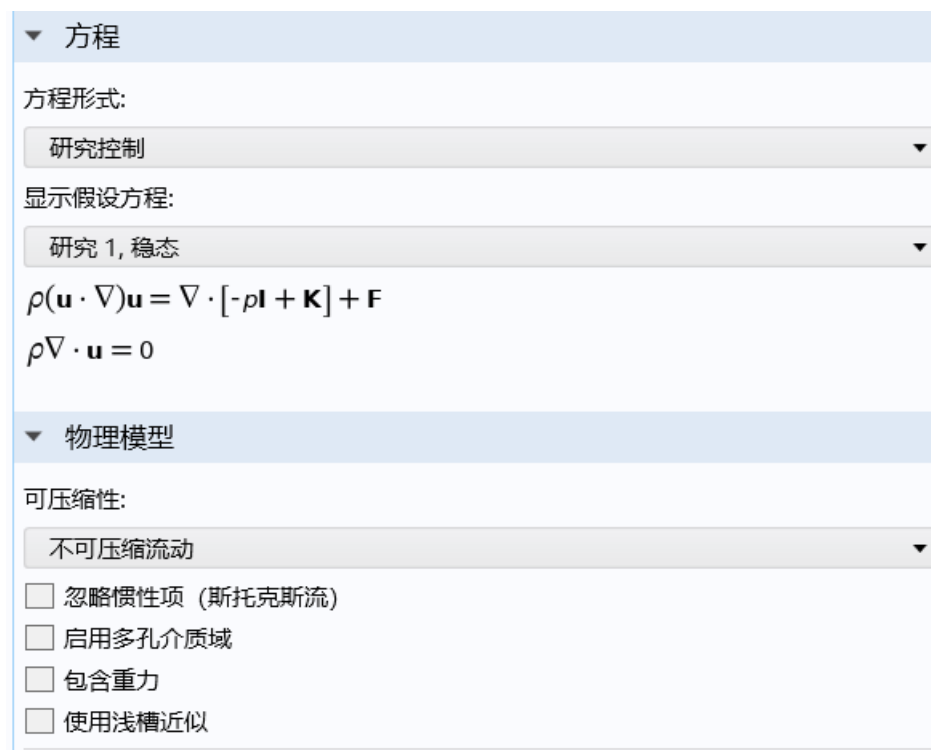
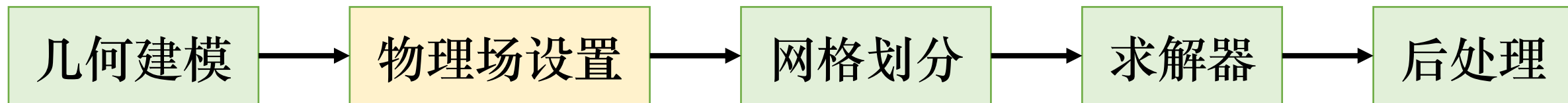
COMSOL Multiphysics®的一般流程



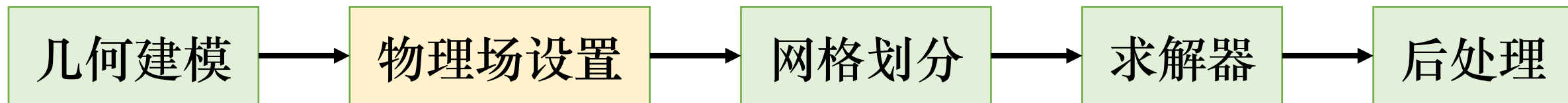
- 几何 1
 - 矩形 1 (*r1*)
 - 多边形 1 (*pol1*)
 - 形成联合体 (*fin*)



COMSOL Multiphysics®的一般流程



COMSOL Multiphysics®的一般流程



电磁

AC/DC 模块
RF 模块
波动光学模块
射线光学模块
等离子体模块
半导体模块

结构 & 声学

结构力学模块
非线性结构材料模块
复合材料模块
岩土力学模块
疲劳模块
转子动力学模块
多体动力学模块
MEMS 模块
声学模块

流体 & 传热

CFD 模块
搅拌器模块
聚物流动模块
微流体模块
多孔介质流模块
地下水流模块
管道流模块
分子流模块
金属加工模块
传热模块

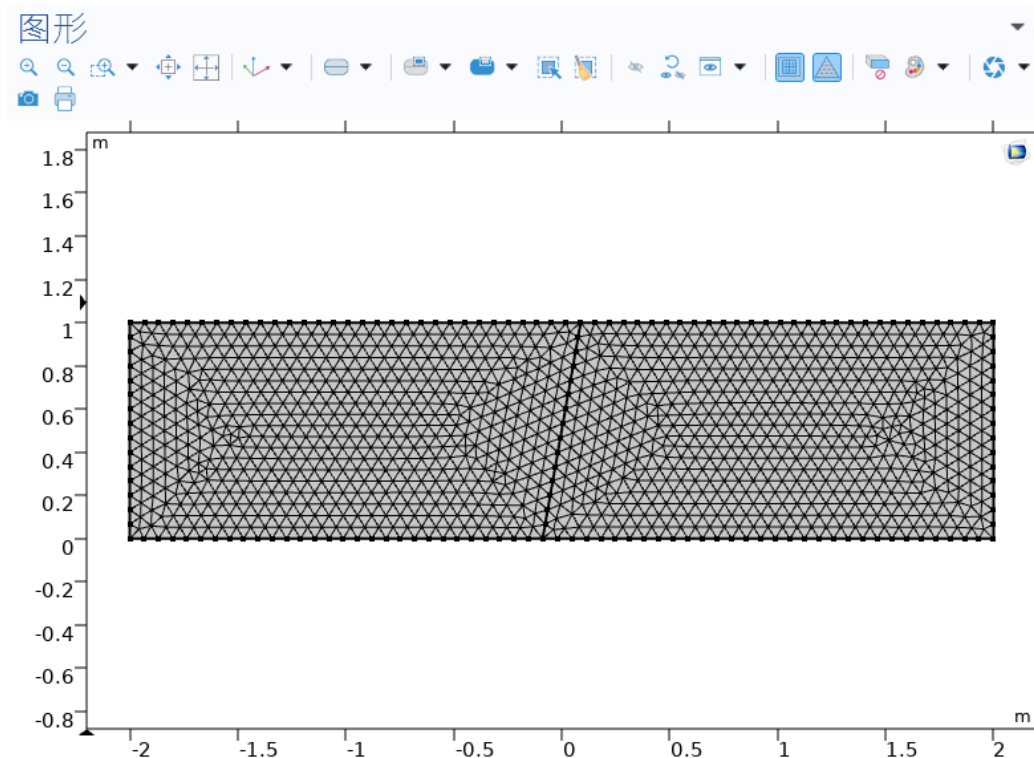
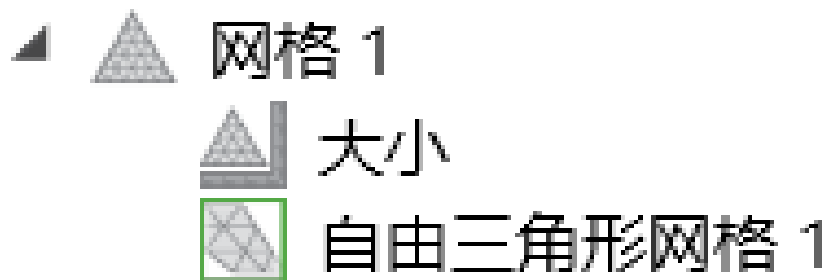
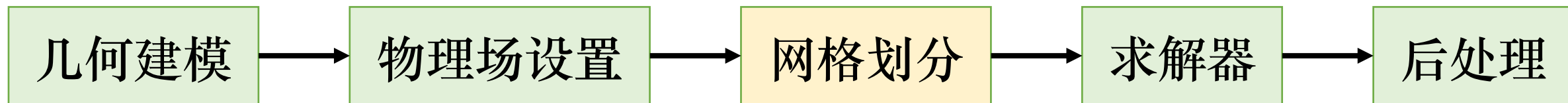
化工

化学反应工程模块
电池模块
燃料电池和电解槽模块
电镀模块
腐蚀模块
电化学模块

多功能

优化模块
不确定性量化模块
材料库
粒子追踪模块
气液属性模块

COMSOL Multiphysics®的一般流程



COMSOL Multiphysics®的一般流程



研究 1

参数化扫描

步骤 1: 稳态

求解器配置

解 1 (sol1)

参数化解 1 (sol2)

作业配置

参数化扫描 1

常规

线性求解器: 直接

方法和终止

非线性方法: 自动 (牛顿)

初始阻尼系数: 1

最小阻尼系数: 1E-4

更新步长的限制: 10

步长增长的限制: 1

使用恢复阻尼系数: 自动

恢复阻尼系数: 0.75

更新权重中的自动比例因子: 开

终止技术: 容差

最大迭代次数: 100

容差因子: 1

终止准则: 解或残差

残差因子: 1000

时间步进

求解器类型: 隐式

方法: 向后差分公式

求解器采用的步长: 自由

☒ 在结束时间插值解

初始步长: s

最大步长约束: 自动

最大 BDF 阶次: 5

最小 BDF 阶次: 1

事件容差: 0.01

☐ 非线性控制器

代数变量设置

奇异质量矩阵: 可能

一致初始化: 后向欧拉法

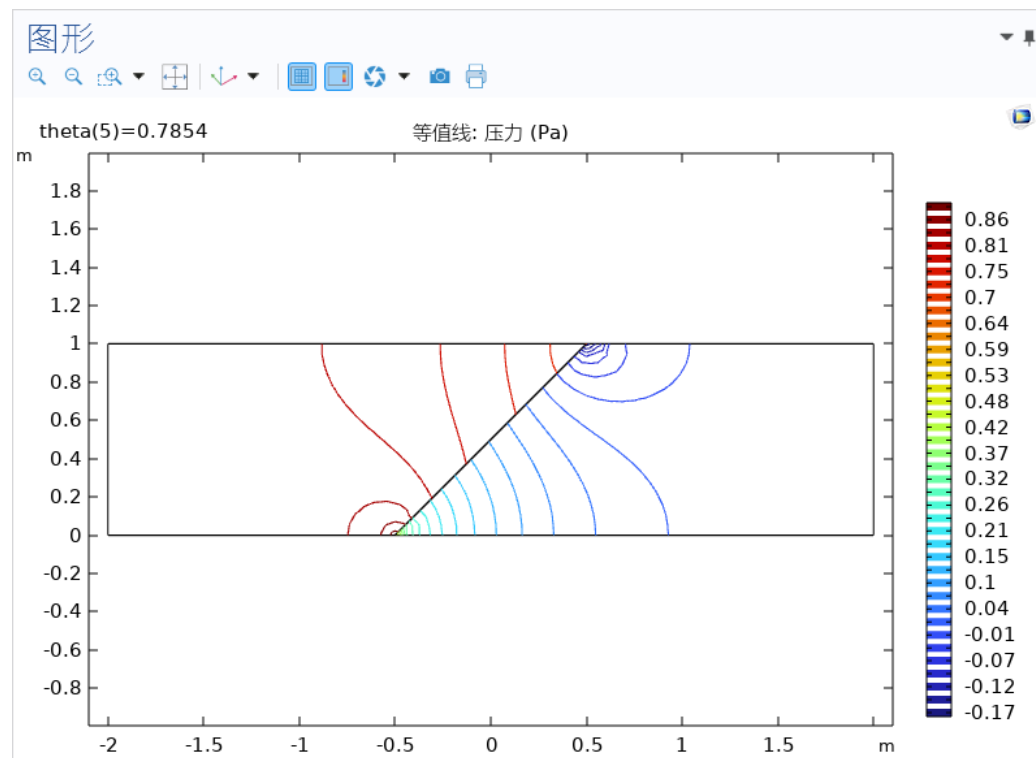
后向欧拉法初始步长分数: 0.001

后向欧拉法的安全系数: 20

误差估计: 包含代数

☐ 初始化后重新缩放

COMSOL Multiphysics®的一般流程





怎么学习COMSOL Multiphysics®

- ① 先了解基础的面板与操作
- ② 多跑案例，多尝试
- ③ 查看文档，不断修改自己的模型



怎么学习COMSOL Multiphysics®

- ① [COMSOL官方视频中心](#)
- ② [COMSOL官方案例库](#)
- ③ COMSOL官方博客
- ④ COMSOL内置的帮助……

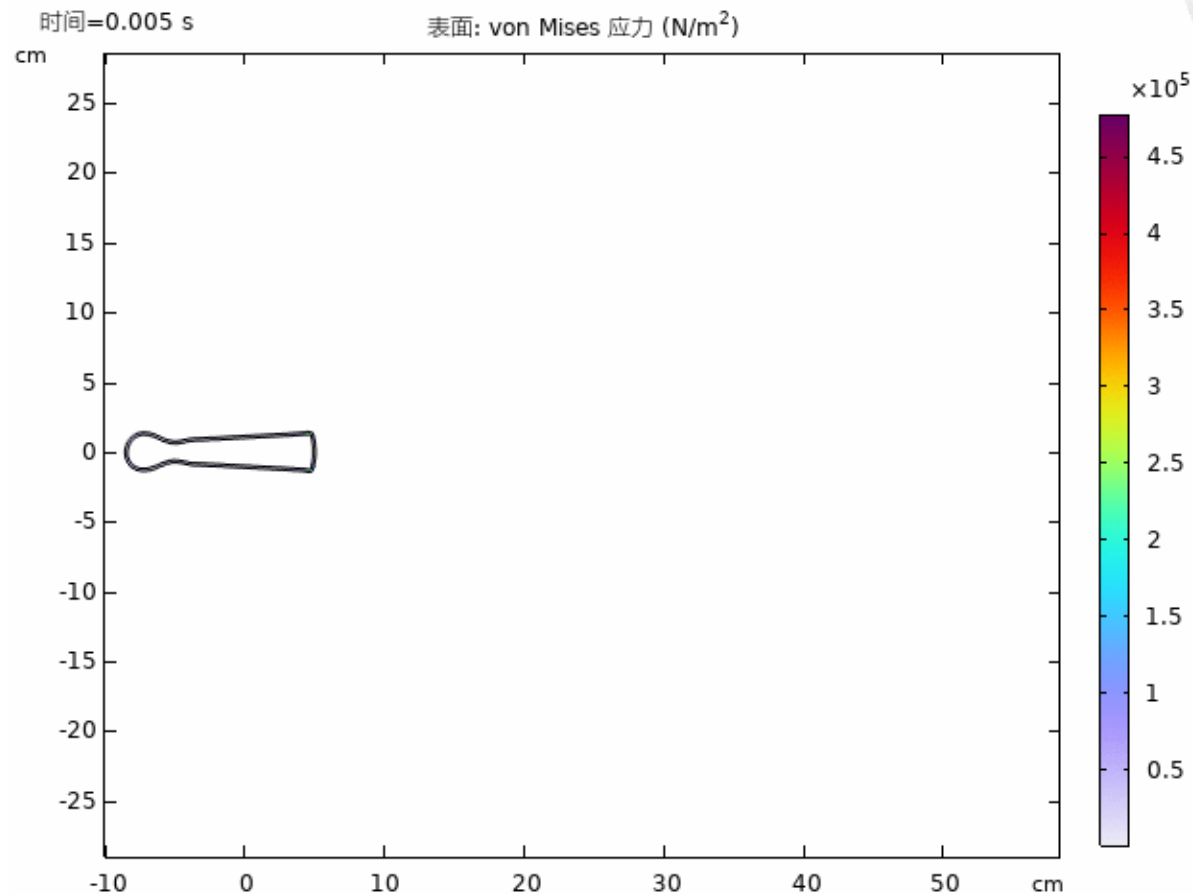
手把手案例

13. Shooting Rubber Band

A rubber band may fly a longer distance if it is non-uniformly stretched when shot, giving it spin. Optimize the distance that a rubber band with spin can reach.

13. 射击橡皮筋

如果橡皮筋在射击时不均匀拉伸，使其旋转，则可以飞得更远。优化带旋转的橡皮筋能到达的距离。





提问时间



谢谢大家