中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

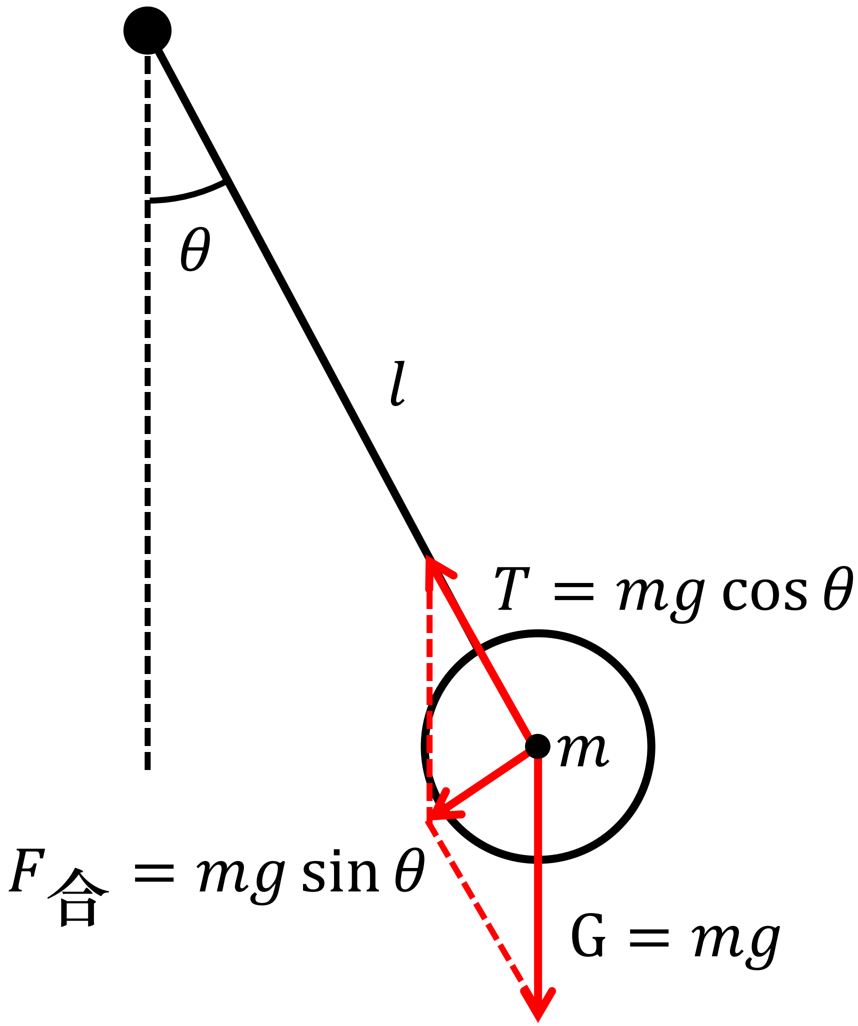
计算物理导论
与
COMSOL Multiphysics®应用

Torchwood物理学社

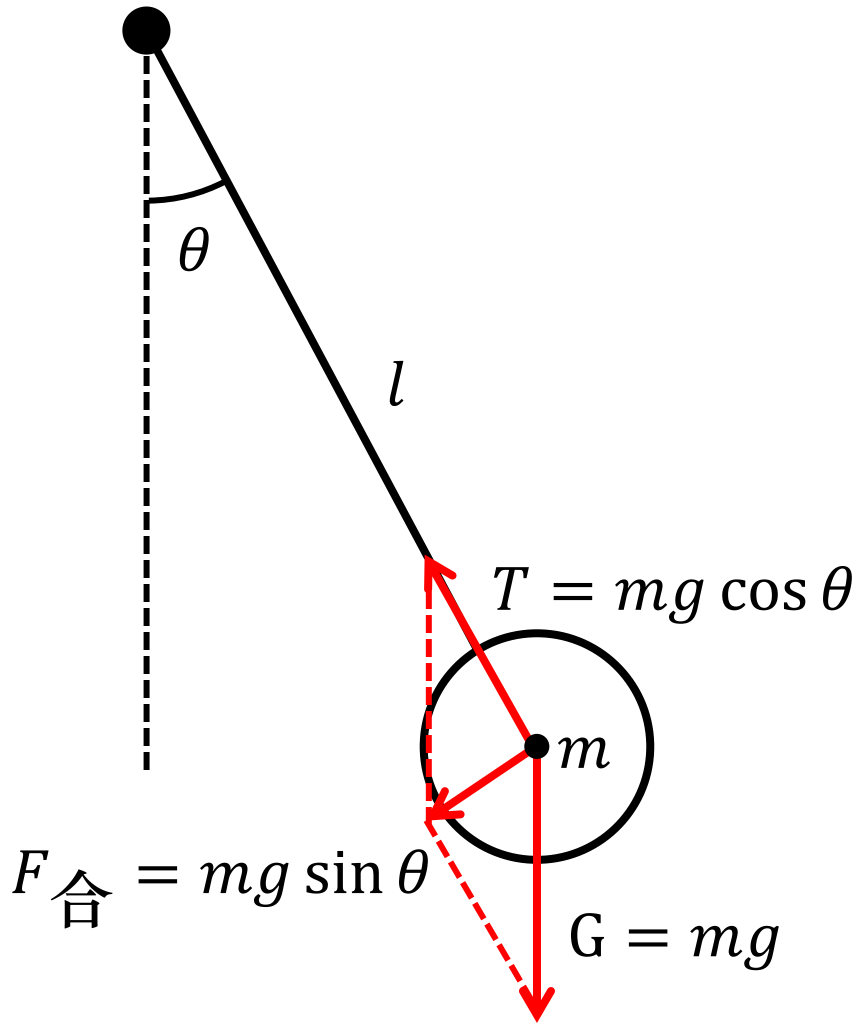
chenle9@mail2.sysu.edu.cn

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：

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

$$I = ml^2$$

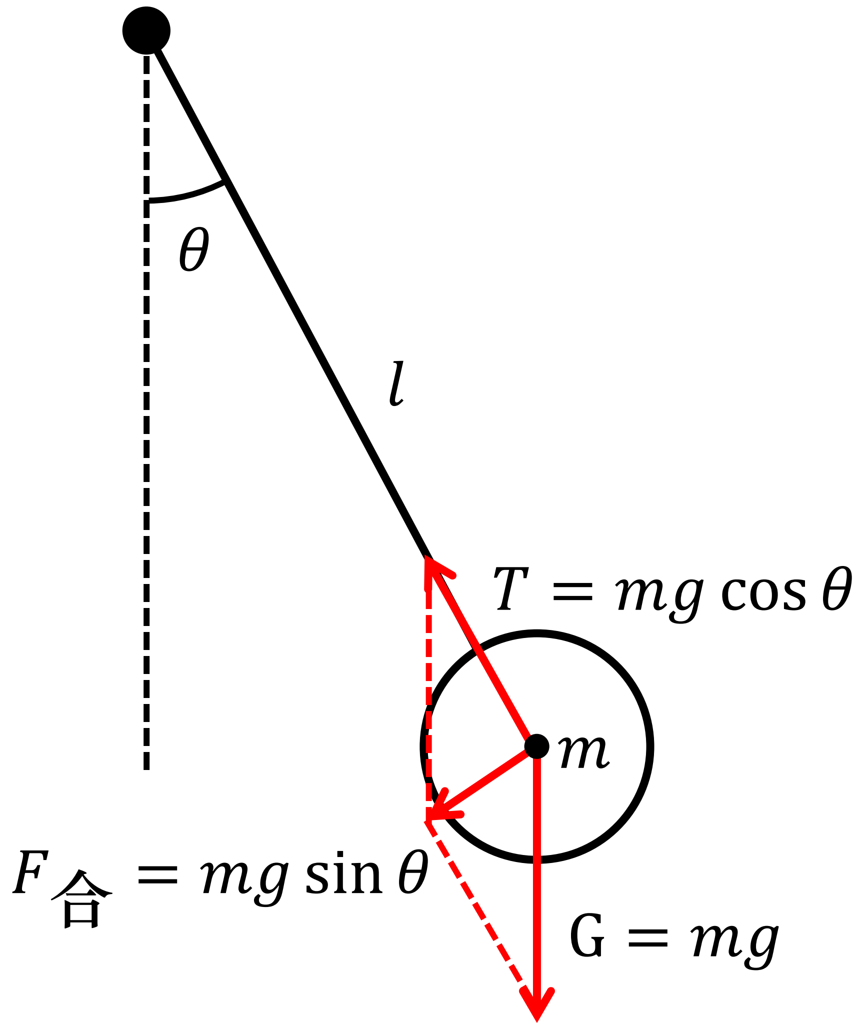
单摆的动力学方程如下：

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

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:

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

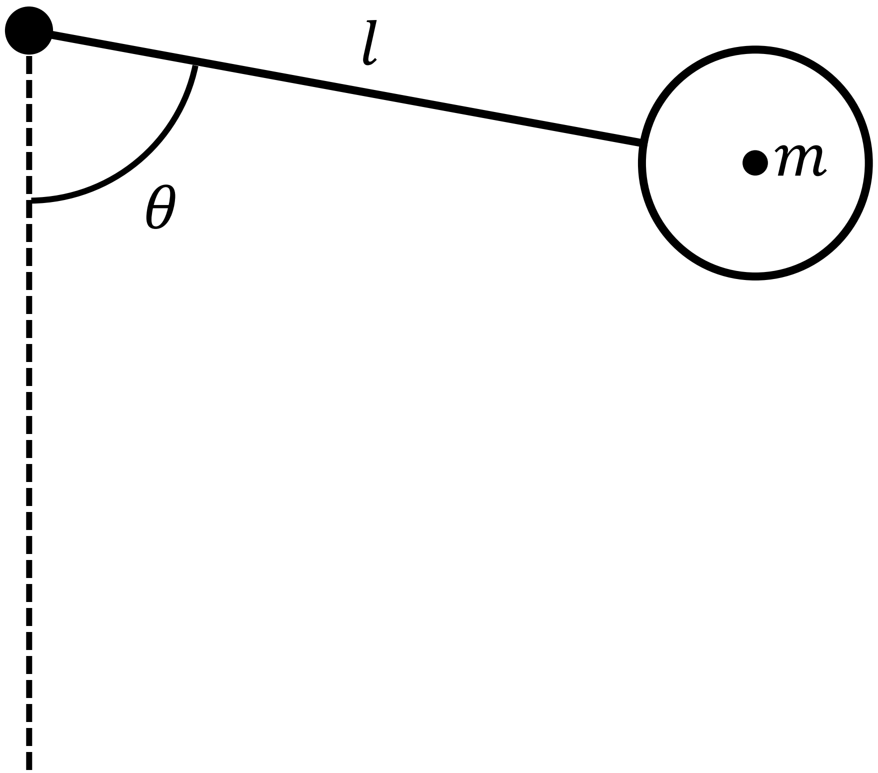
其解析解为:

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

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

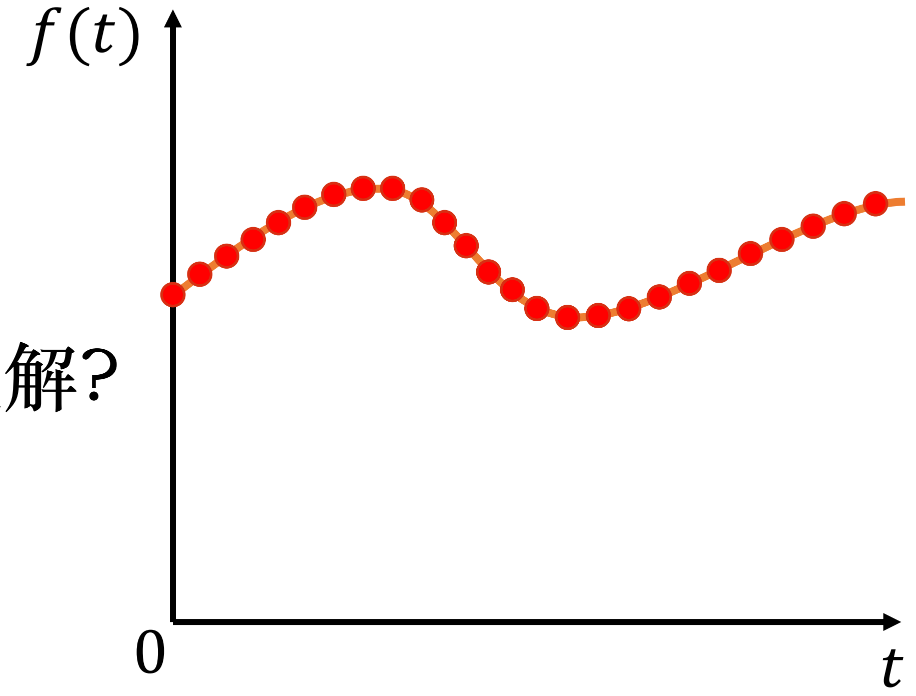
从一个单摆开始

假设有一个函数$f(t)$

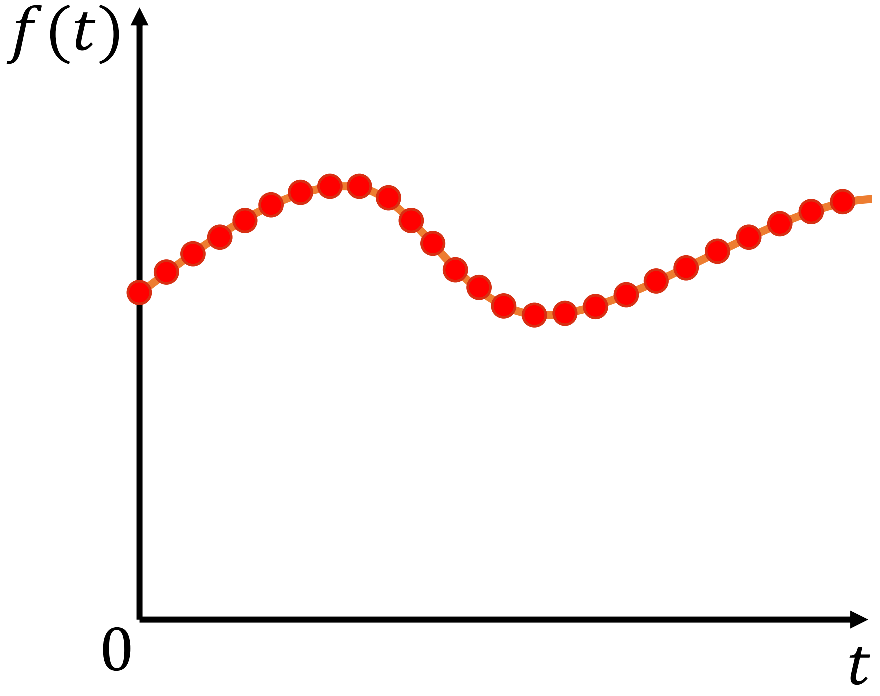
我们知道$f(0)$

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

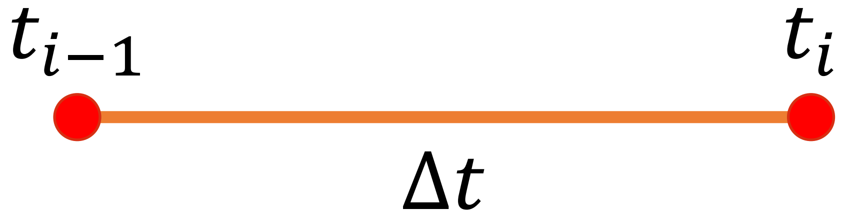


如何离散化时间?

将$f(t)$在$t=t_0$处做泰勒展开:

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

微分方程初值问题数值解



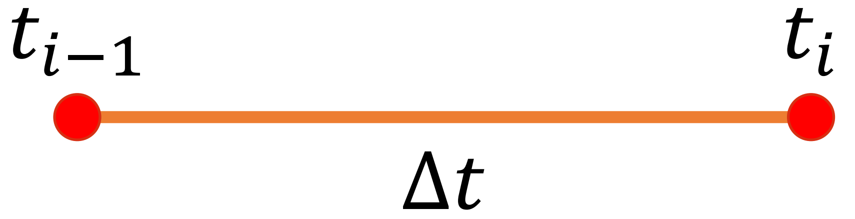
将$f(t_i)$在$t = t_{i-1}$处做泰勒展开：

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

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:

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

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

...

(达到容差)
收敛

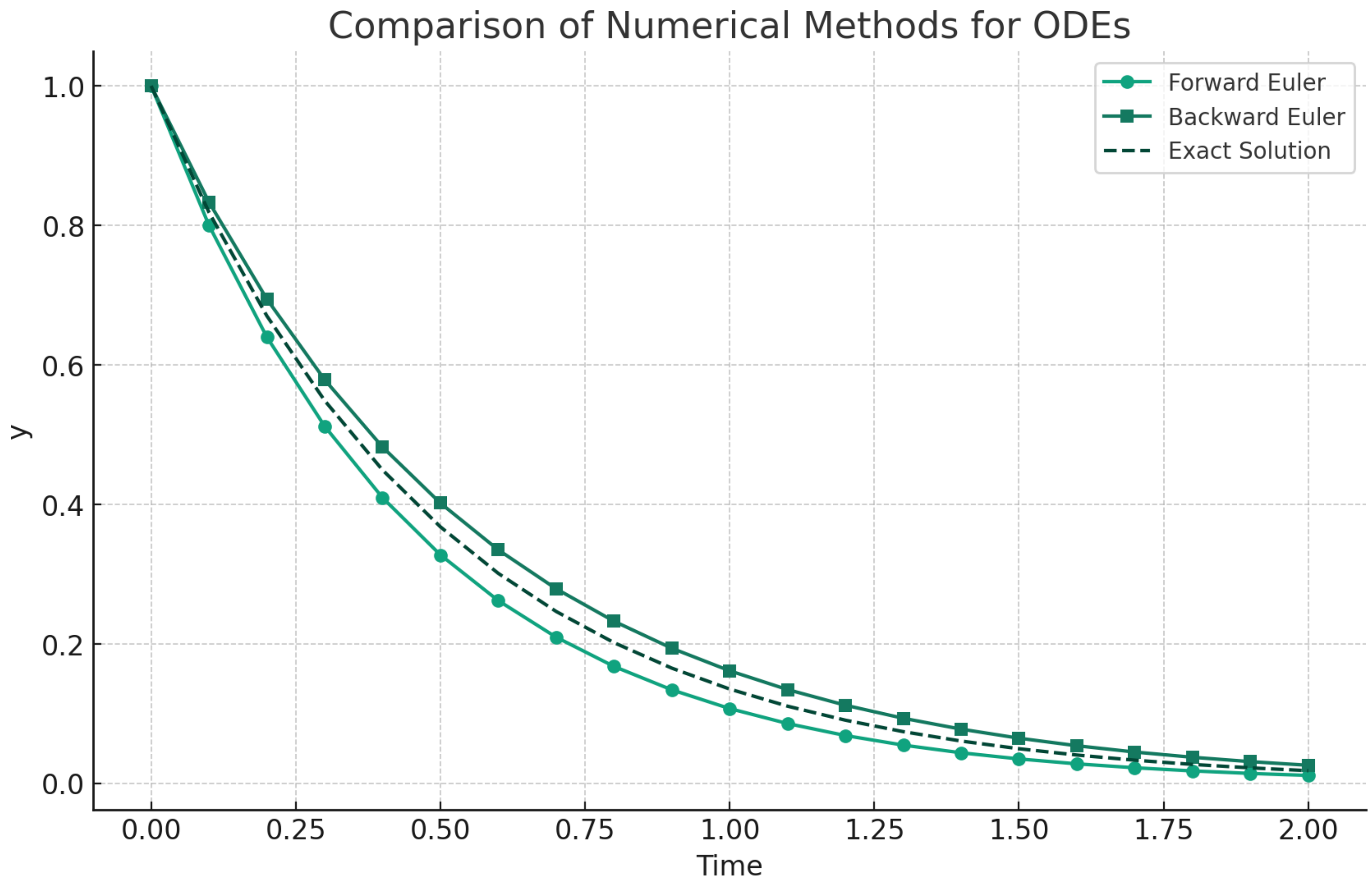
小试牛刀

尝试求解

$$\frac{dy}{dt} = -2y, y(0) = 1$$

解析解：

$$y(t) = e^{-2t}$$



小试牛刀

尝试求解

$$\frac{dy}{dt} = -100y, y(0) = 1$$

解析解：

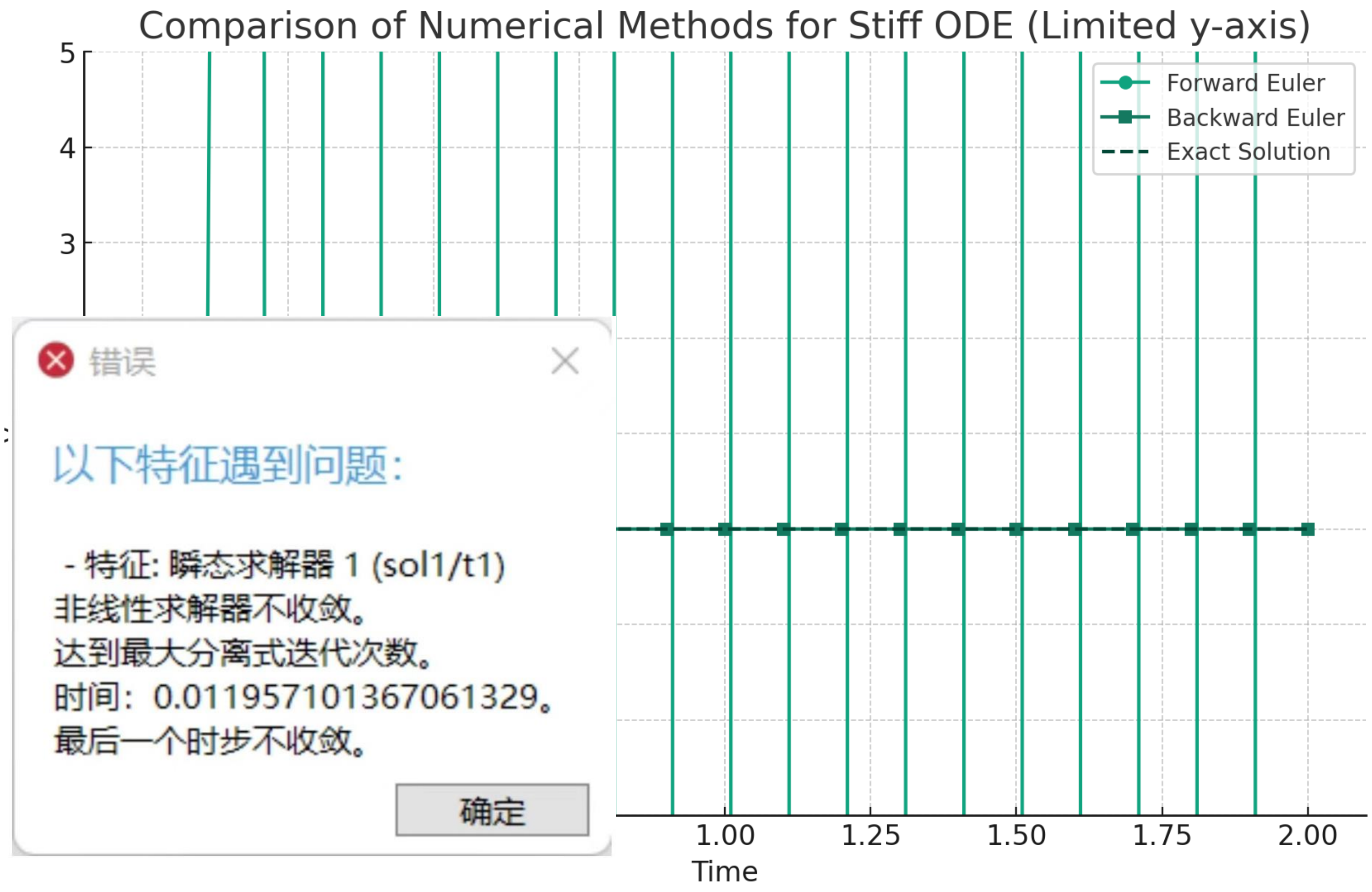
$$y(t) = e^{-100t}$$

隐式方法

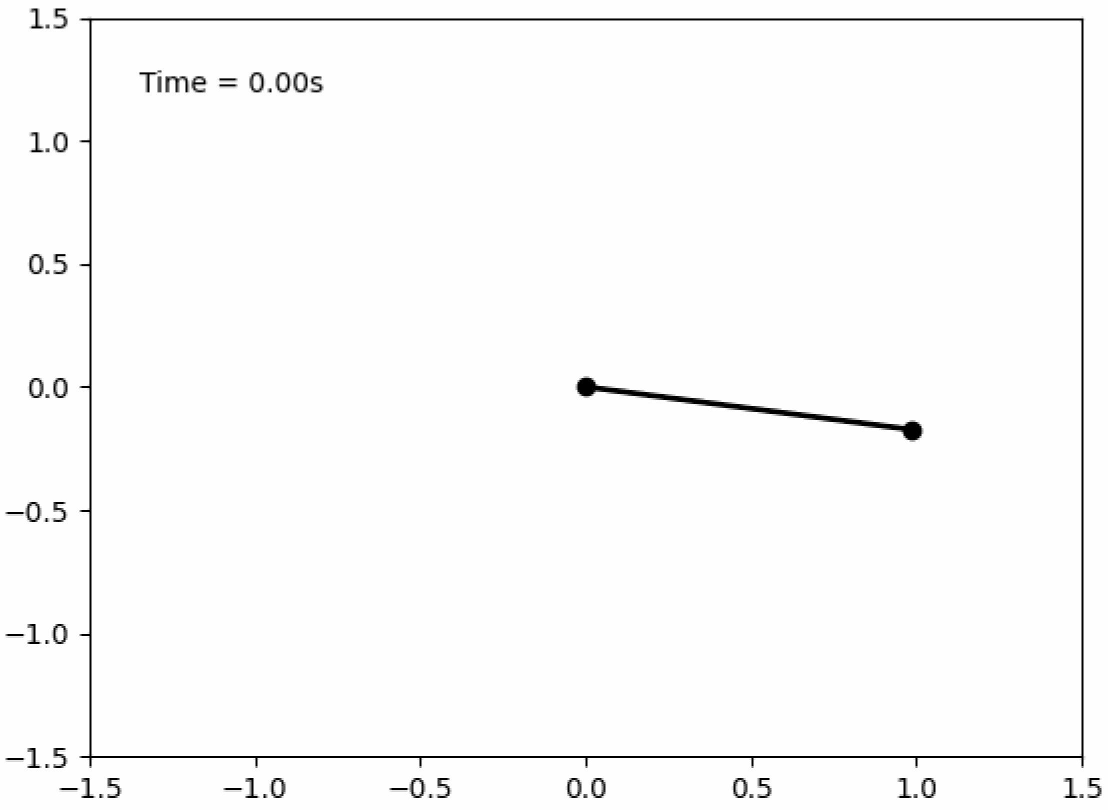
① 稳定性更好

② 计算量大

③ 复杂系统可能不收敛

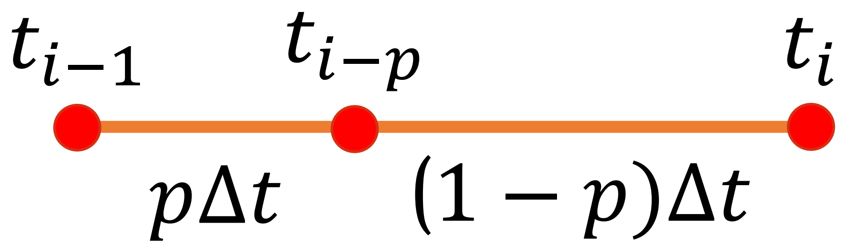


回到单摆



结果不理想，是否有更高精度的方法?

微分方程初值问题数值解



在(t_{i-1},t_i)取一点t_{i-p}

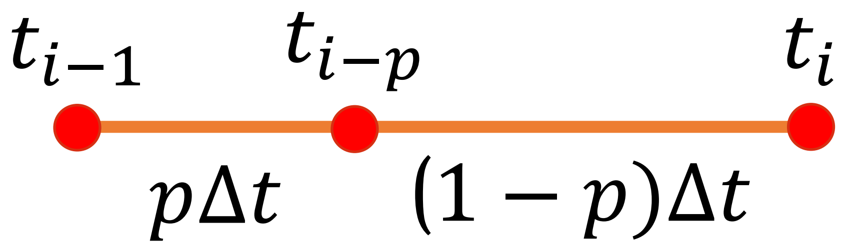
对步进取加权，加权系数为λ:

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

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

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

微分方程初值问题数值解

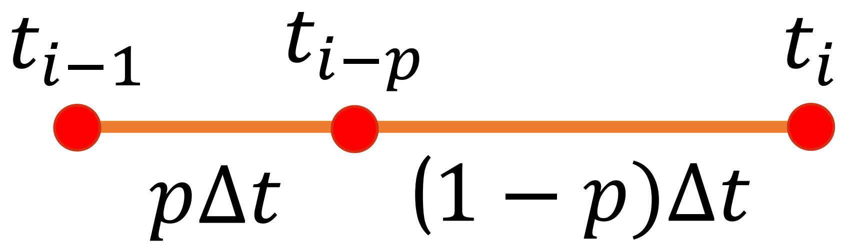


将$f'(t_{i-p})$在$t = t_{i-1}$处做泰勒展开：

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

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

微分方程初值问题数值解



将K_1和K_2代入

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

$$= f(t_{i-1}) + \Delta t(1-\lambda)\, f'(t_{i-1}) + \Delta t\lambda f'(t_{i-1}) + \Delta t\lambda f''(t_{i-1})(p\Delta t) + O(t^3)$$

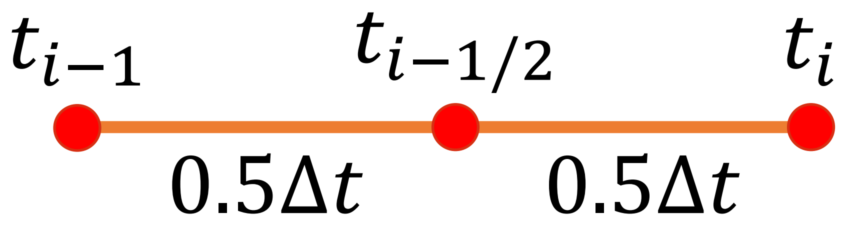
$$= f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})(\Delta t) + \lambda p f''(t_{i-1})(\Delta t)^2 + O(t^3)$$

$$= f(t_{i-1}) + f'(t_{i-1})(\Delta t) + \frac{1}{2!} f''(t_{i-1})(\Delta t)^2 + O(t^3)$$

将$f(t_i)$在$t = t_{i-1}$处做泰勒展开

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

微分方程初值问题数值解



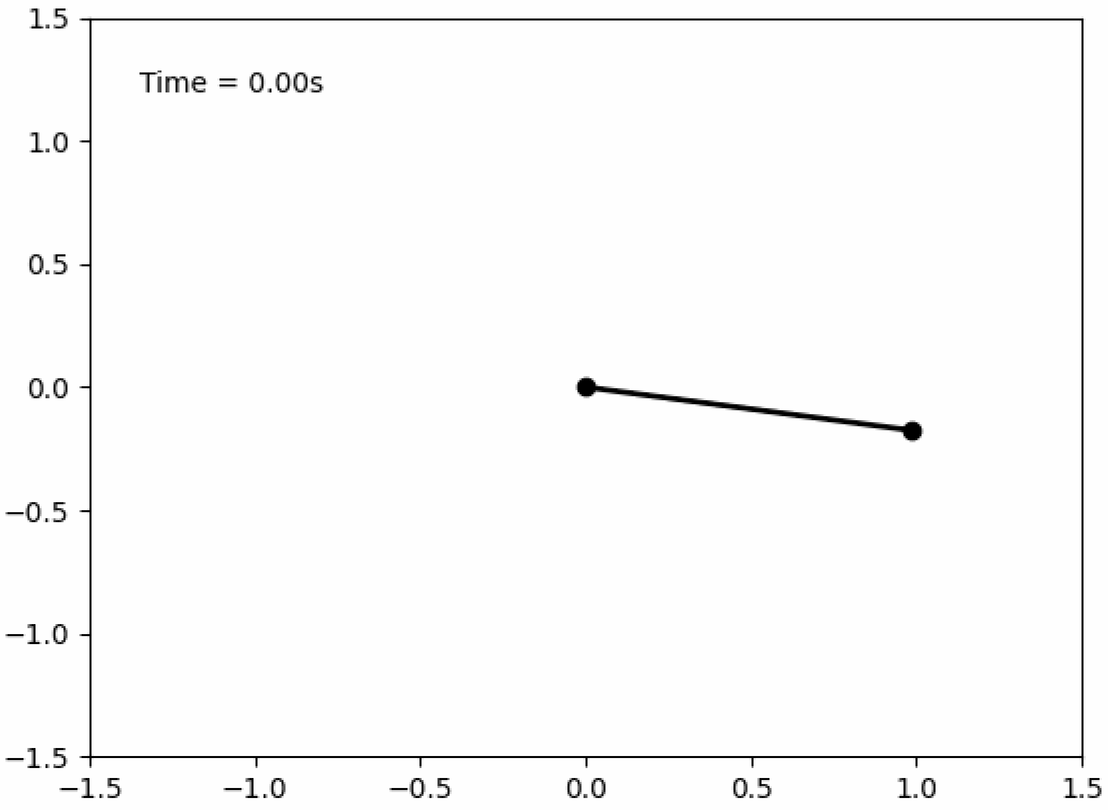
二阶龙格-库塔方法（中点格式）：

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

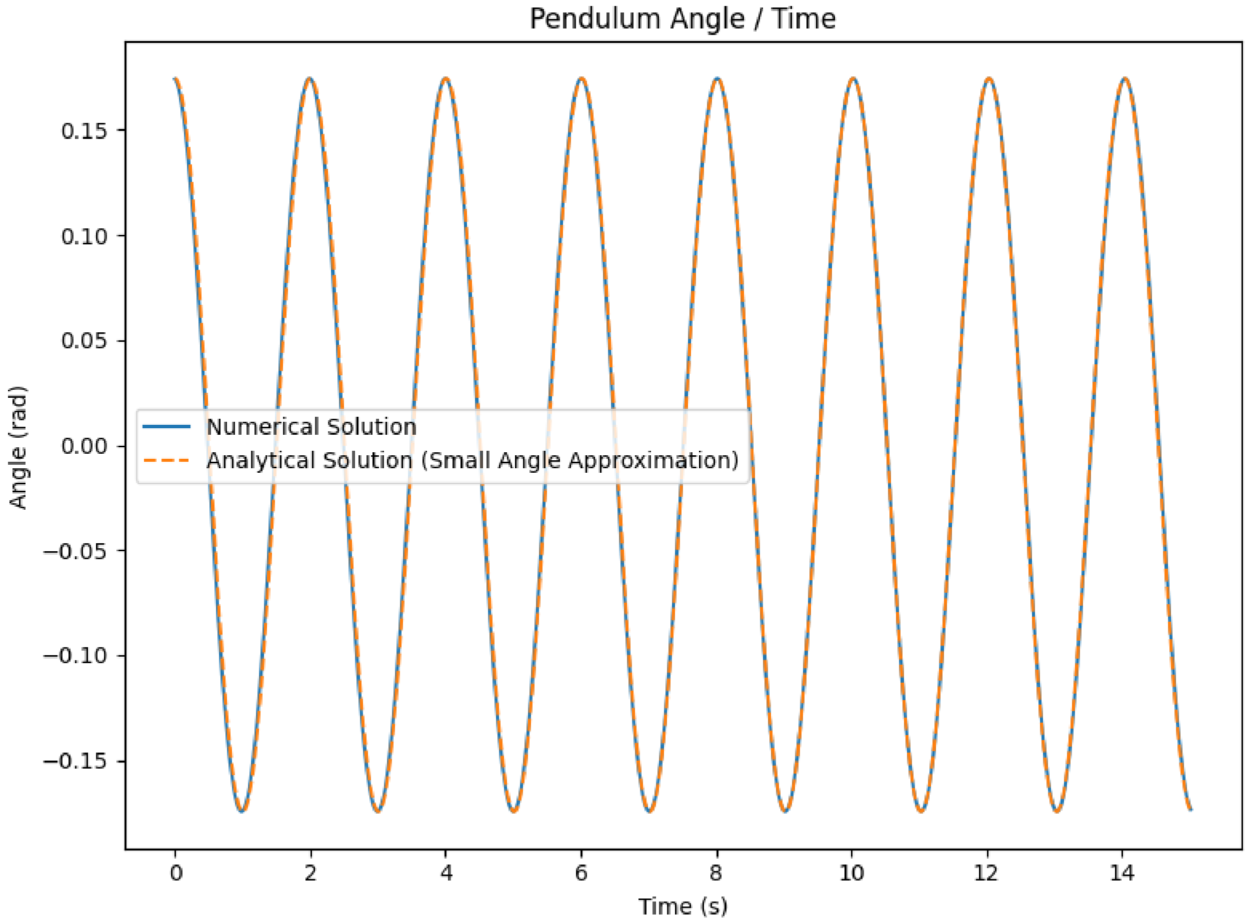
$$f(t_i) = f(t_{i-1}) + \Delta t K_2$$

$$K_2 = f'\left(t_{i-1/2}\right)$$

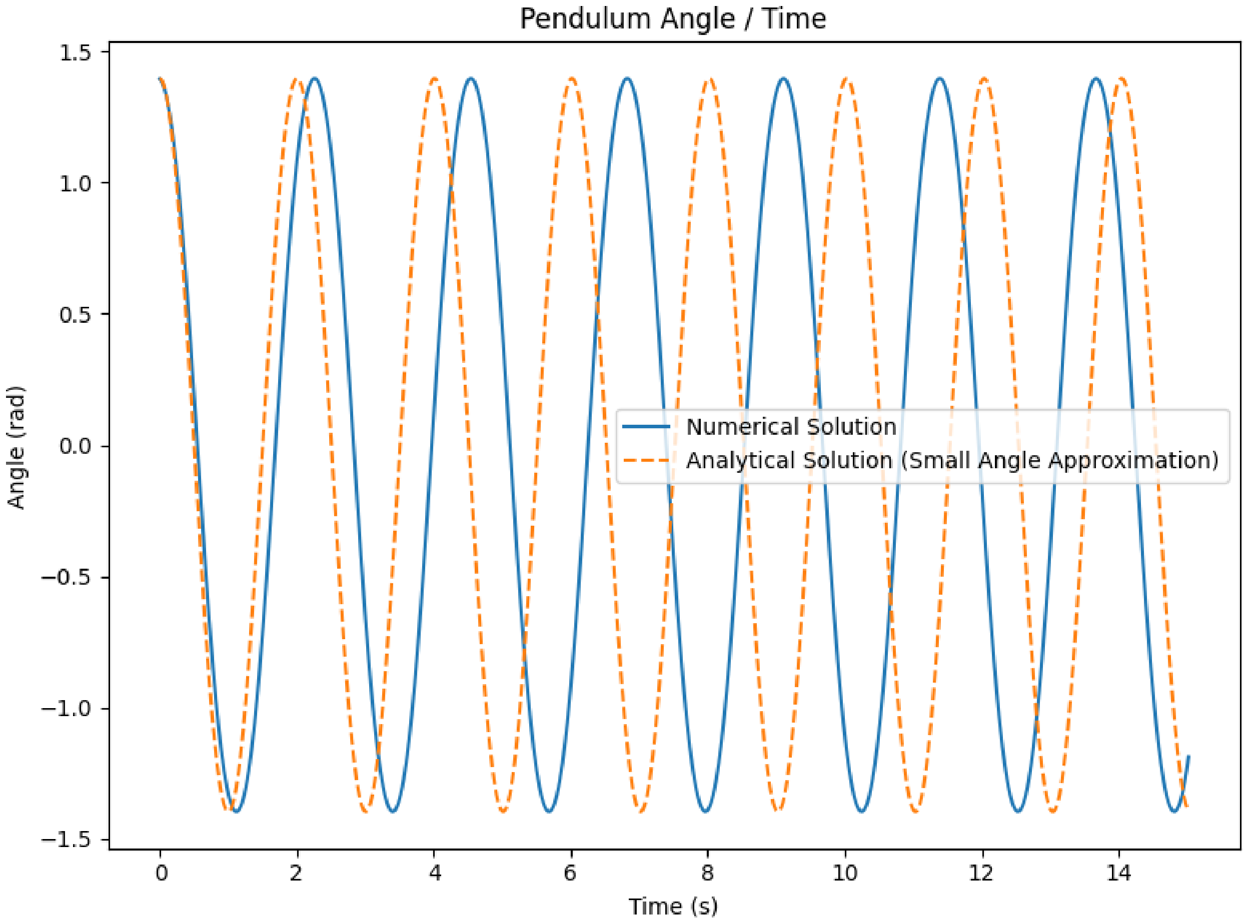
回到单摆



回到单摆

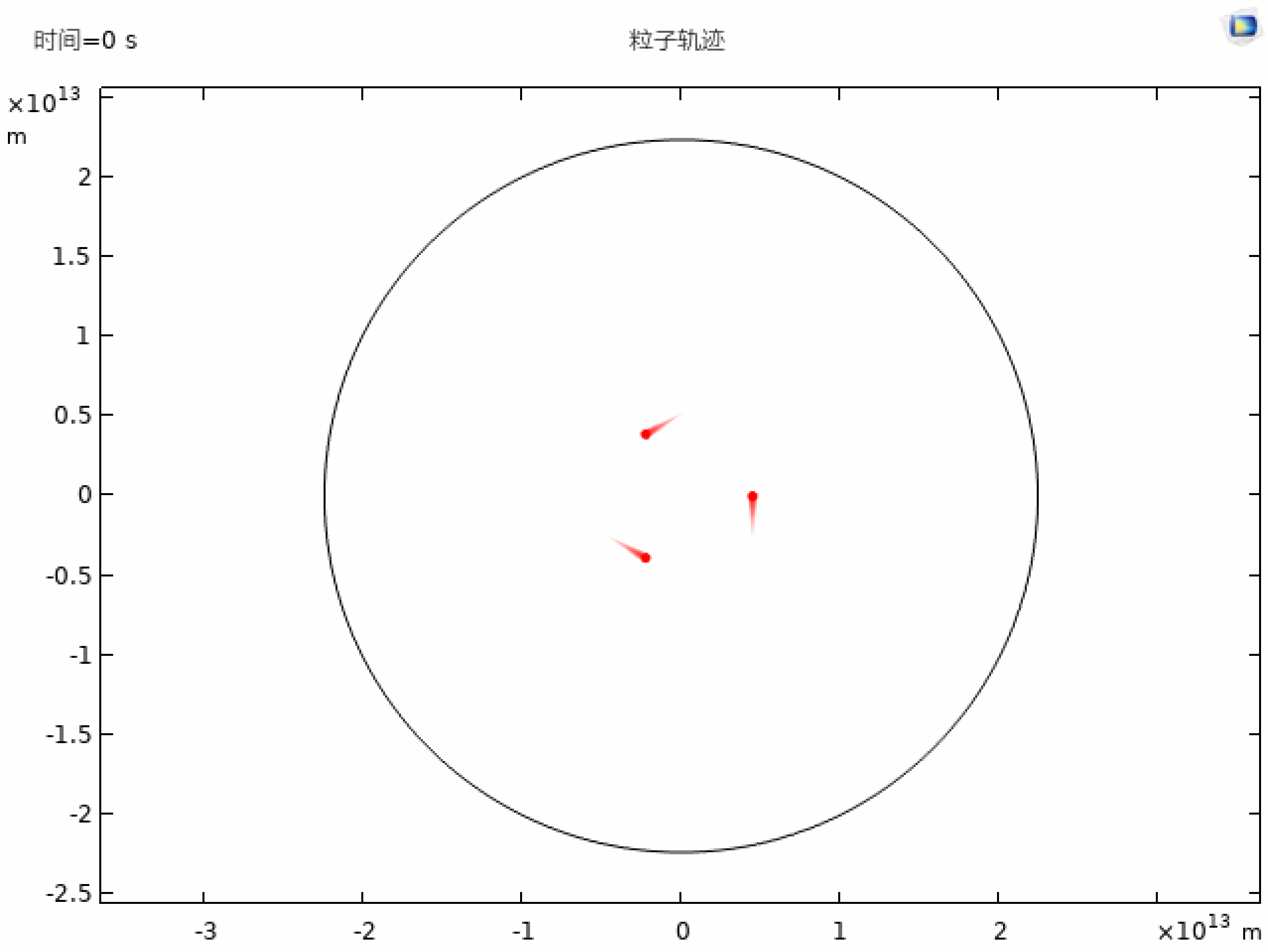


$$\theta = 10°$$



$$\theta = 80°$$

更加复杂的物理系统



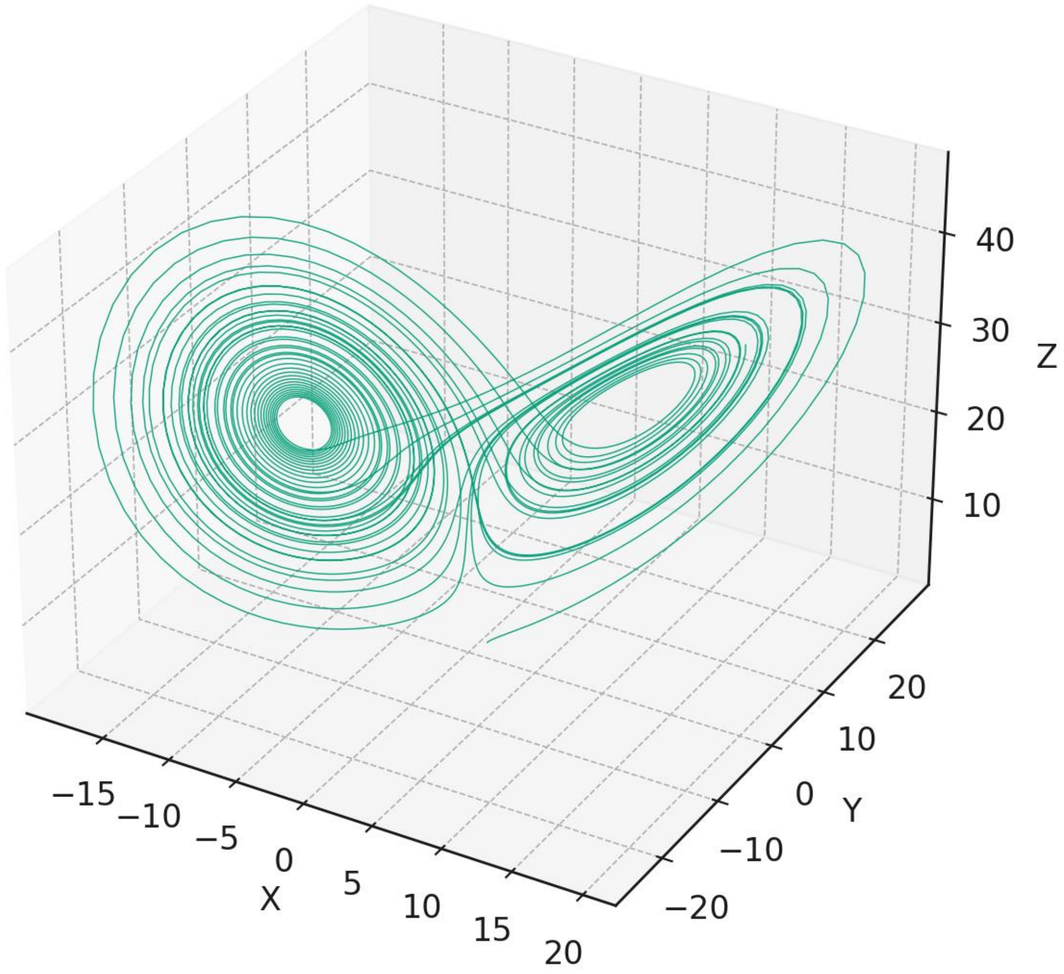
三体问题

更加复杂的物理系统

考虑方程（洛伦兹吸引子方程）：

$$
\begin{cases}
\dfrac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \\
\dfrac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y \\
\dfrac{dz}{dt} = xy - \beta z
\end{cases}
$$

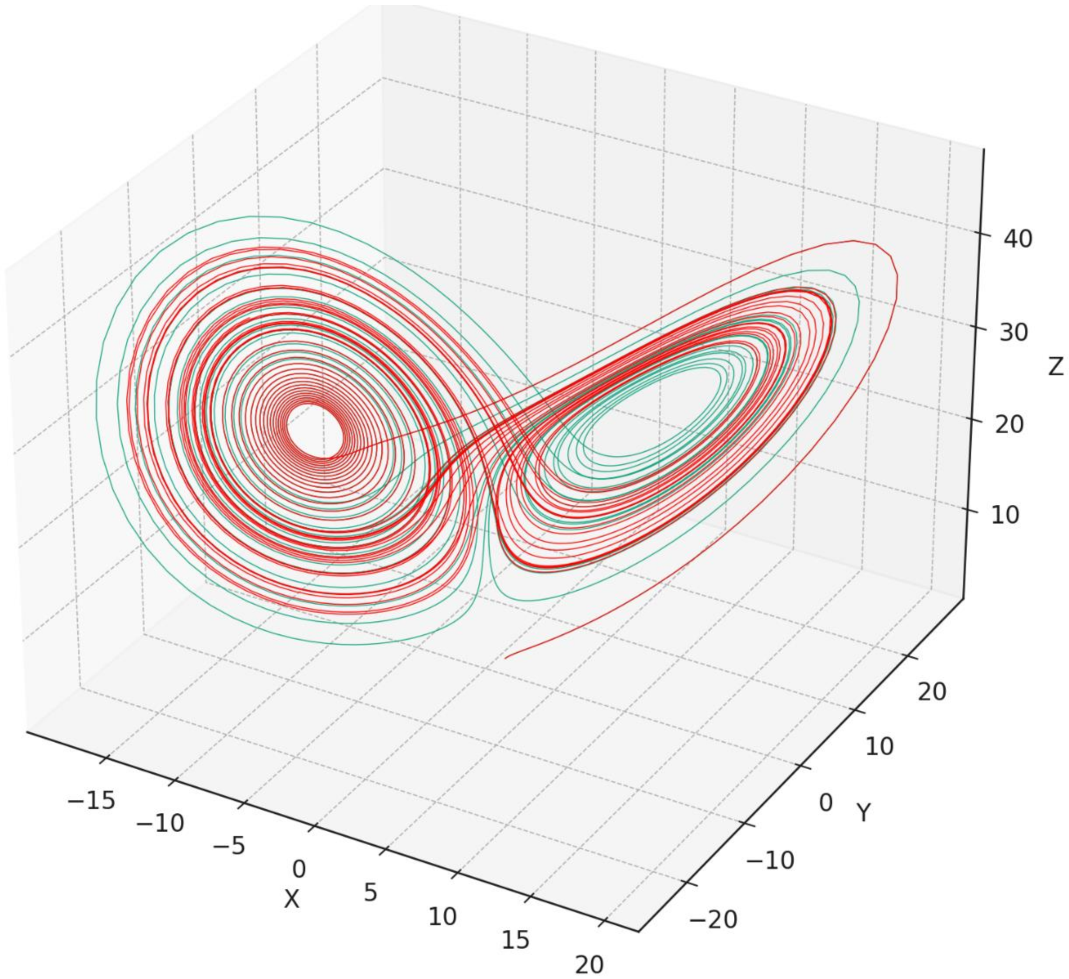
更加复杂的物理系统



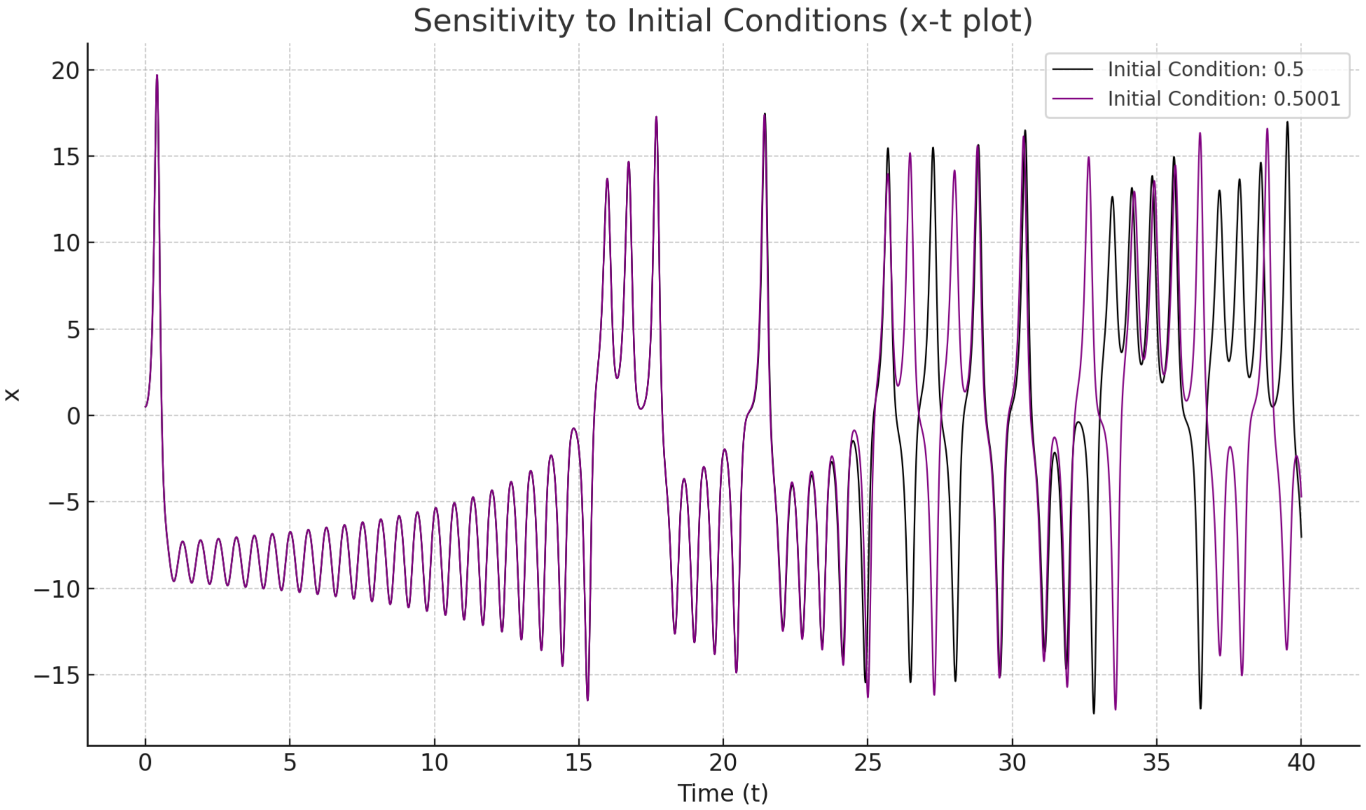
洛伦兹吸引子方程：

$$
\begin{cases}
\dfrac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \\
\dfrac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y \\
\dfrac{dz}{dt} = xy - \beta z
\end{cases}
$$

更加复杂的物理系统

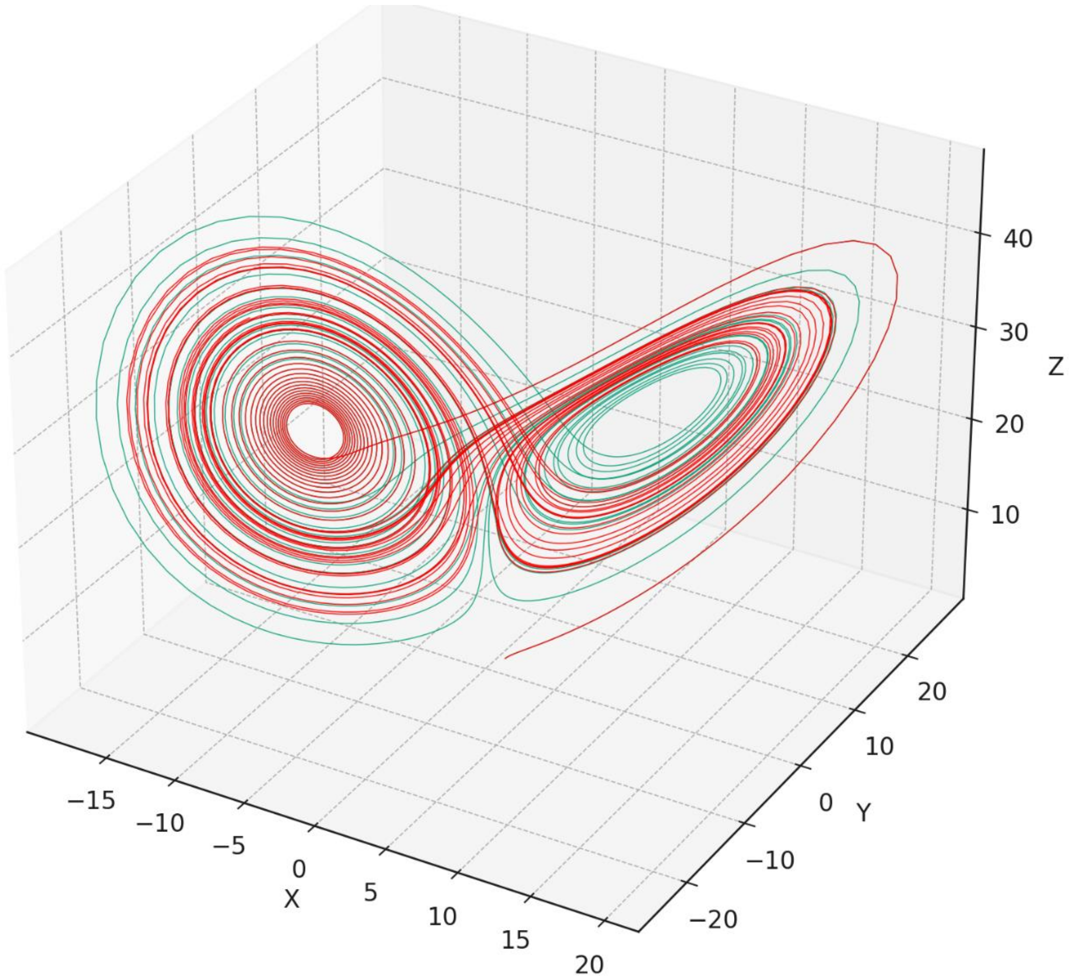


40
30
20
10
Z
−15
−10
−5
0
5
10
15
20
X
20
10
0
−10
−20
Y



Sensitivity to Initial Conditions (x-t plot)
Initial Condition: 0.5
Initial Condition: 0.5001
x
Time (t)
20
15
10
5
0
−5
−10
−15
0
5
10
15
20
25
30
35
40

更加复杂的物理系统



混沌：

巴西某只蝴蝶闪动一下翅膀会引发美国得克萨斯的一场飓风

非线性方程：

$$
\begin{cases}
\dfrac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \\
\dfrac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y \\
\dfrac{dz}{dt} = xy - \beta z
\end{cases}
$$

更加复杂的物理系统

微分方程初值问题数值解：物理过程与时间有关

非线性方程数值解

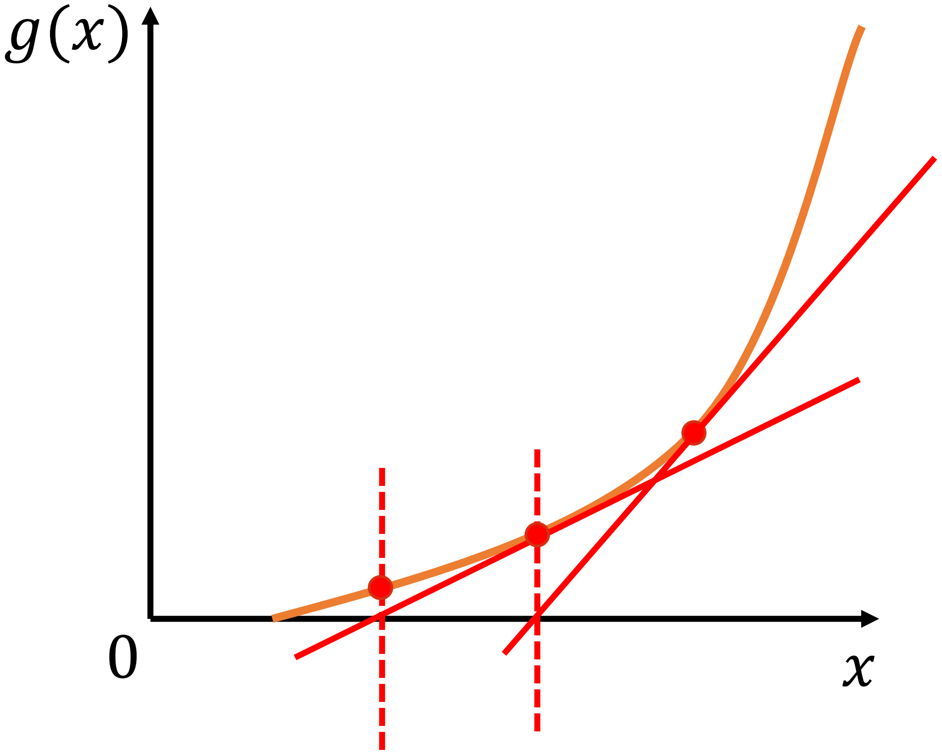
考虑方程（Mooney-Rivlin双参数超弹性模型）：

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

- 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

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



牛顿迭代法：

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

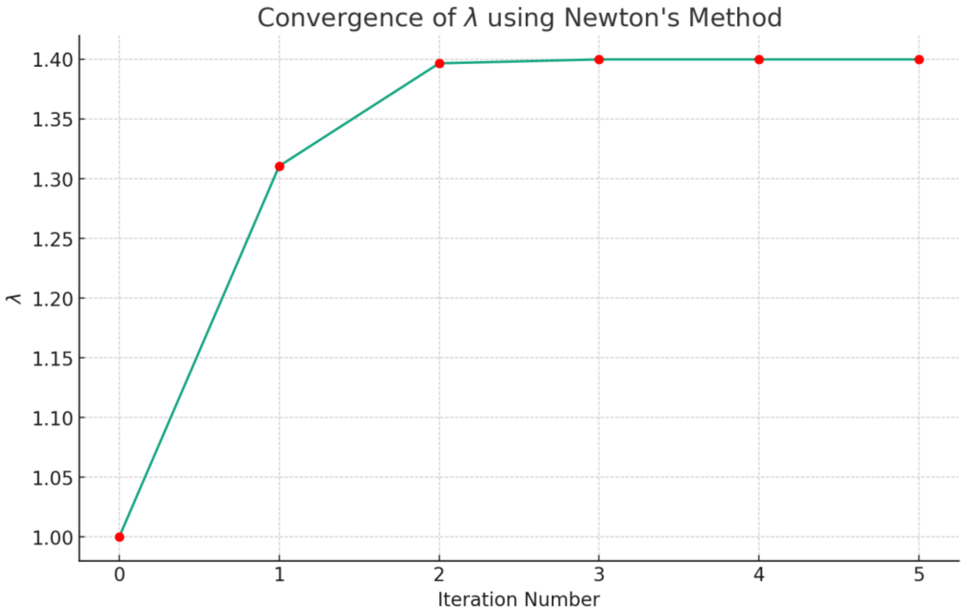
橡皮筋拉伸的数值解

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

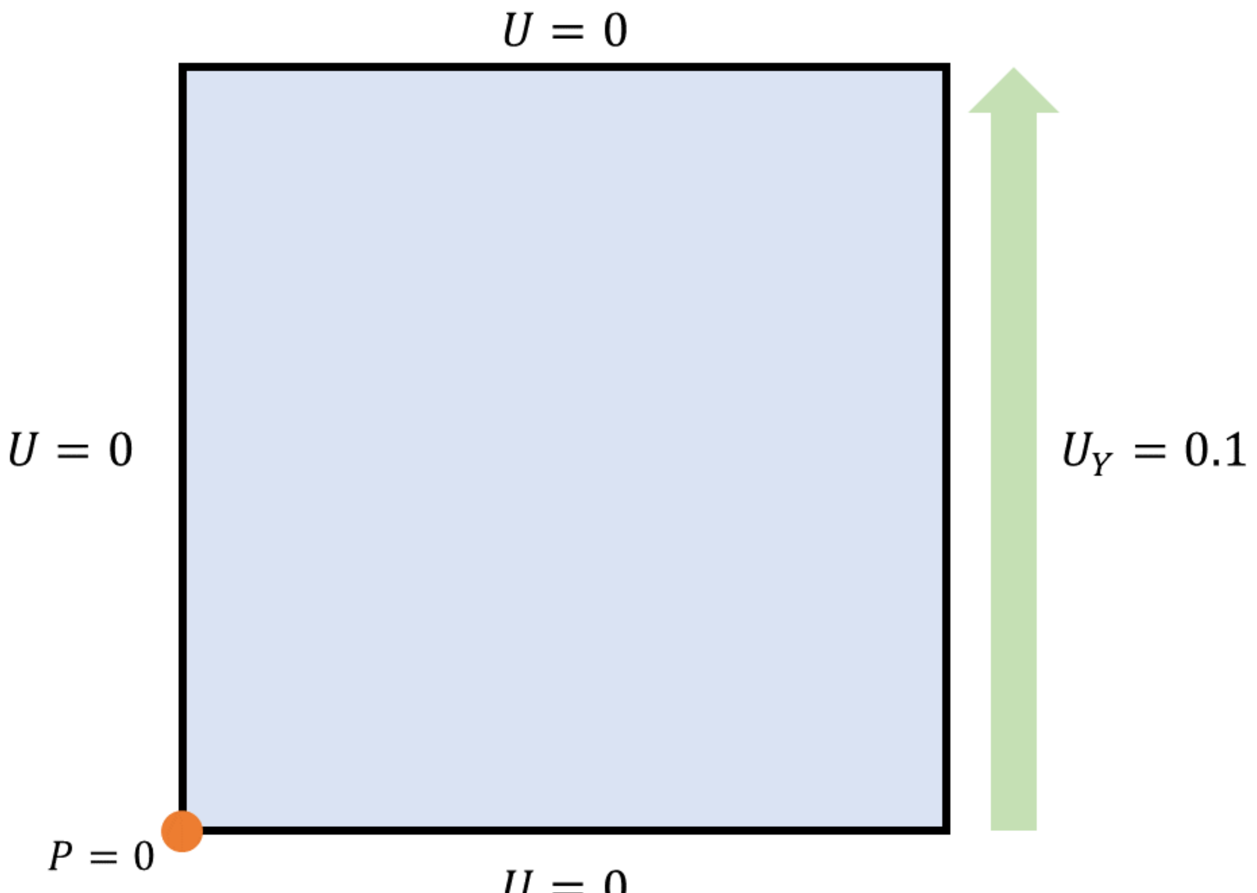
最终解得$\lambda \approx 1.40$



更加现实的物理问题

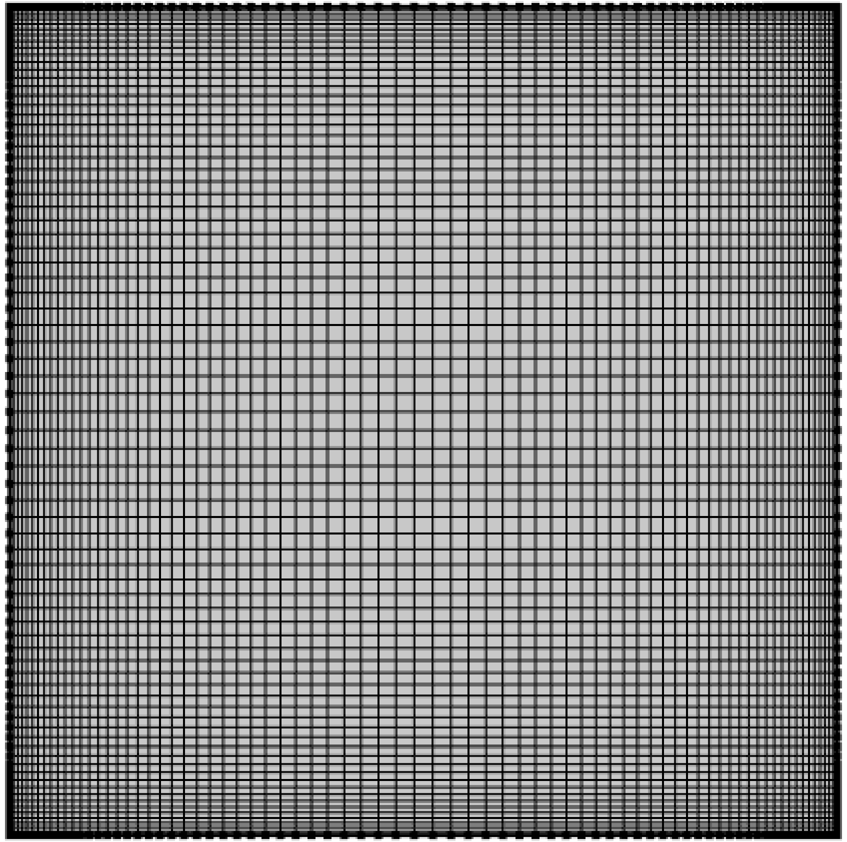
欧拉方程：

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

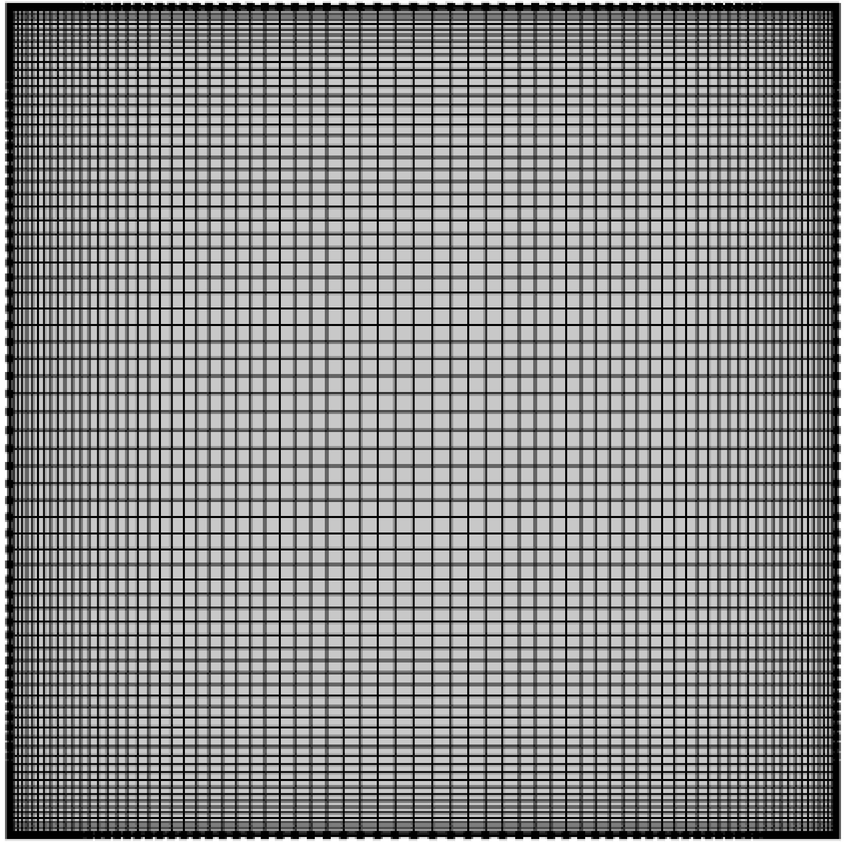


顶盖驱动空腔问题

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

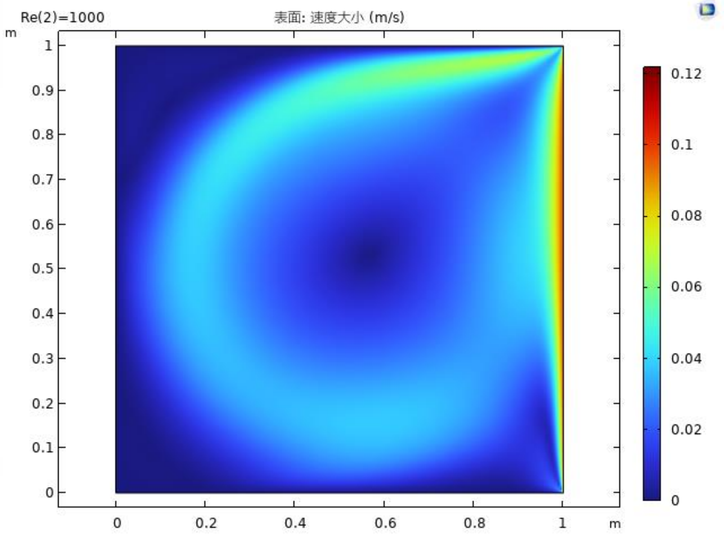
将节点 A、B、C 的平衡关系写成一个方程组，有

类似：

$$\left.\begin{aligned}
&-\tilde{P}_A-\left(\frac{E_1A_1}{l_1}\right)u_A+\left(\frac{E_1A_1}{l_1}\right)u_B+0=0\\
&0+\left(\frac{E_1A_1}{l_1}\right)u_A-\left(\frac{E_1A_1}{l_1}+\frac{E_2A_2}{l_2}\right)u_B+\left(\frac{E_2A_2}{l_2}\right)u_C=0\\
&P_C-0+\left(\frac{E_2A_2}{l_2}\right)u_B-\left(\frac{E_2A_2}{l_2}\right)u_C=0
\end{aligned}\right\}$$

写成矩阵形式，有

$$\begin{bmatrix}-\tilde{P}_A\\0\\P_C\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}\frac{E_1A_1}{l_1} & -\frac{E_1A_1}{l_1} & 0\\ -\frac{E_1A_1}{l_1} & \frac{E_1A_1}{l_1}+\frac{E_2A_2}{l_2} & -\frac{E_2A_2}{l_2}\\ 0 & -\frac{E_2A_2}{l_2} & \frac{E_2A_2}{l_2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_A\\u_B\\u_C\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$



小总结

空间离散化 → 方程展开 → 求解矩阵 → 瞬态/稳态 → 后处理

$\underbrace{\text{空间离散化} \rightarrow \text{方程展开}}_{\text{有限元方法}}$

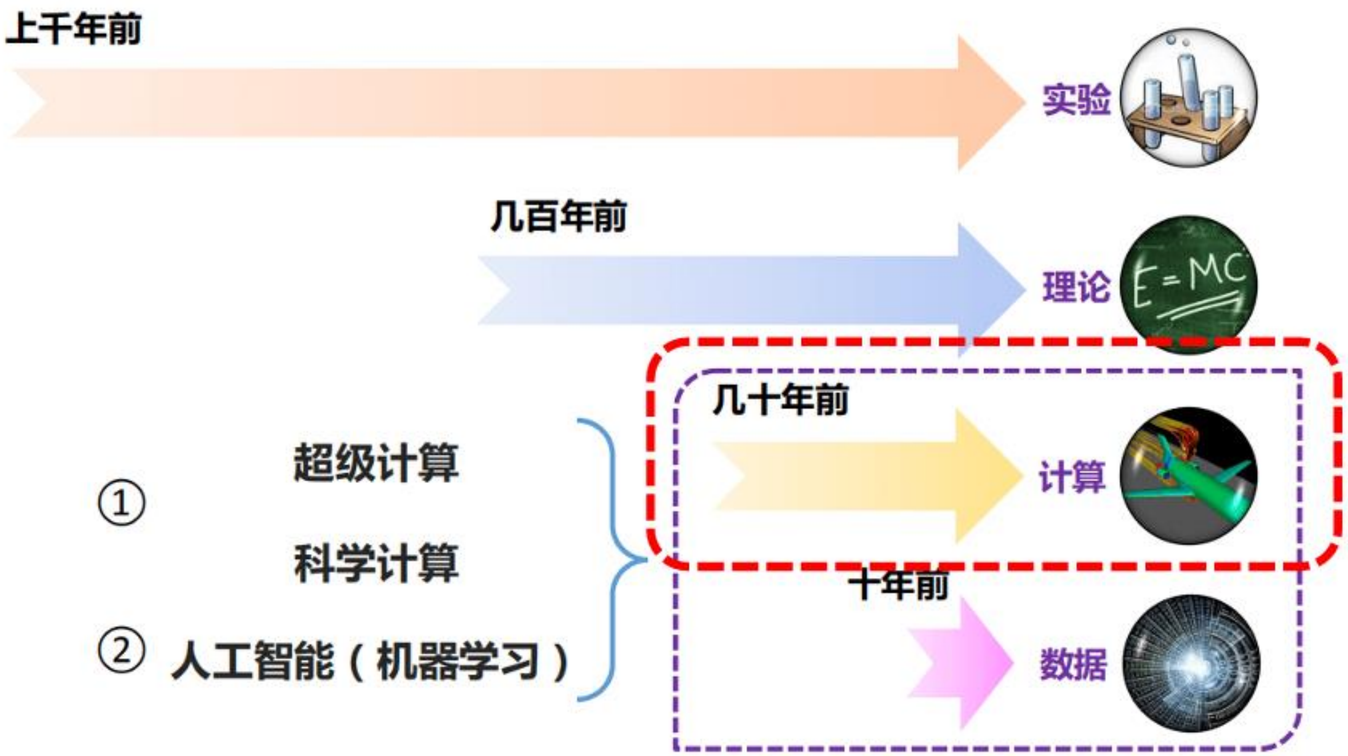
有限元方法

直接/迭代

后向欧拉法

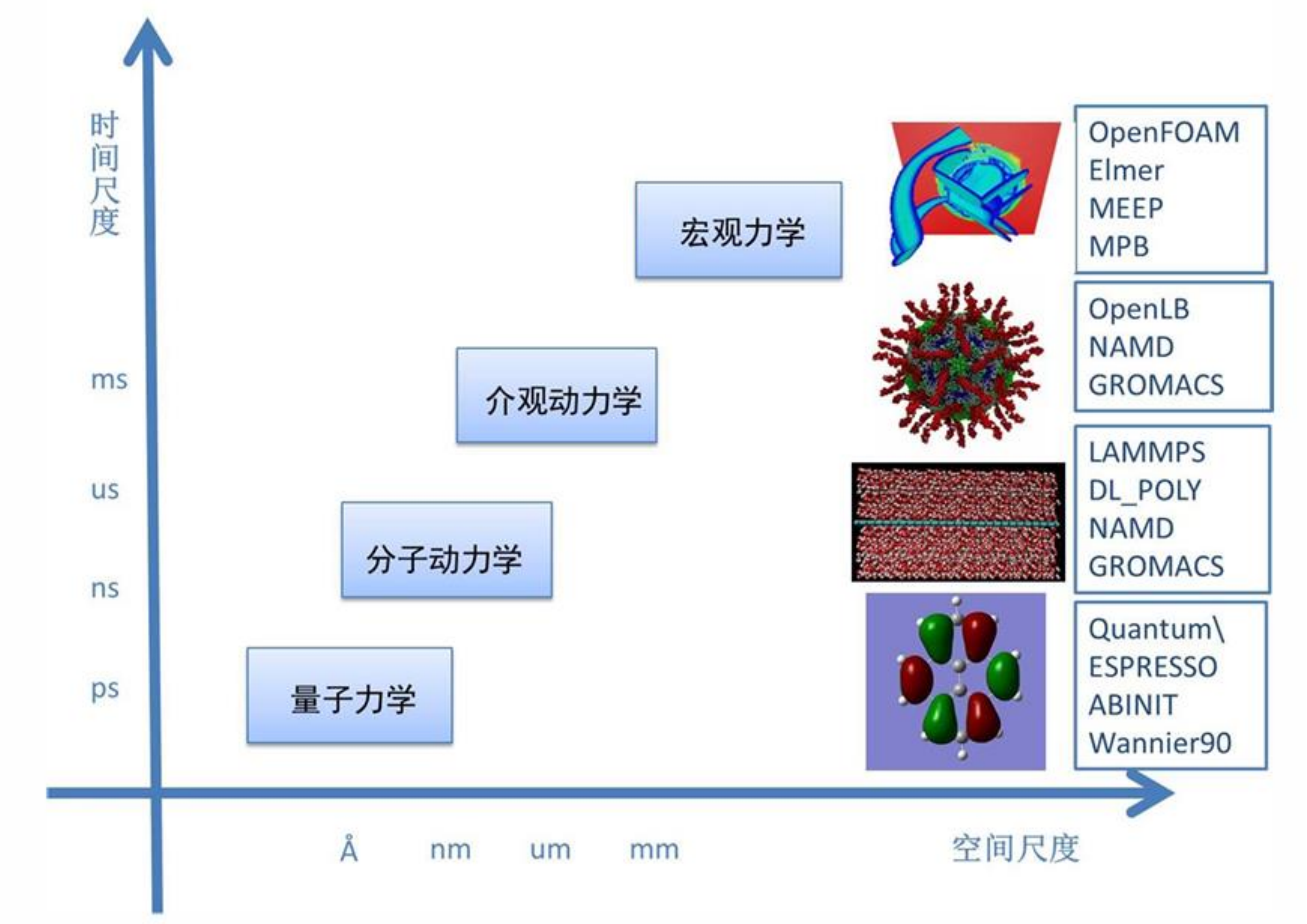
非线性：牛顿迭代

现代计算机模拟方法导论

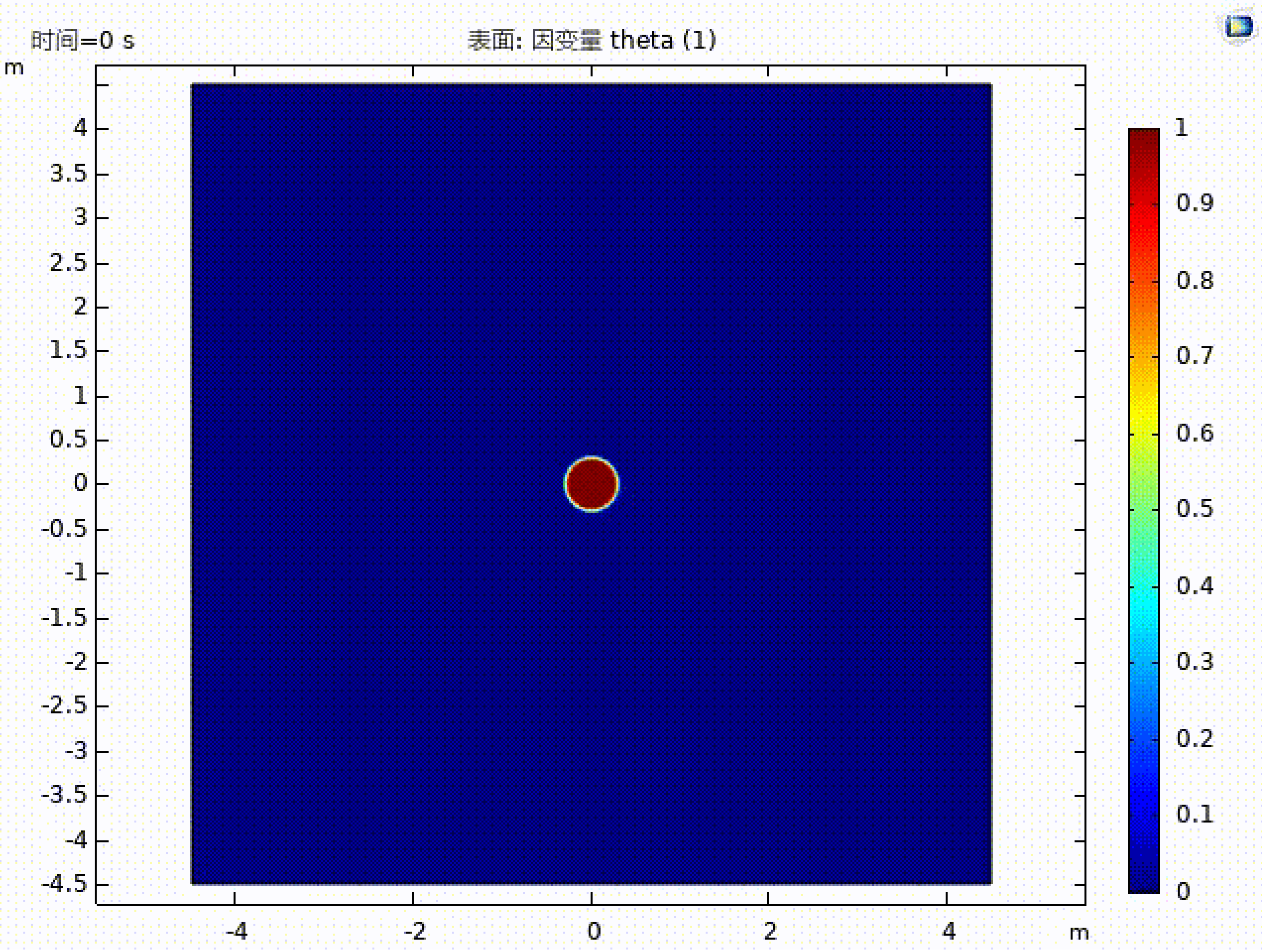


Jim Gray, *The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery*, 2009

现代计算机模拟方法导论

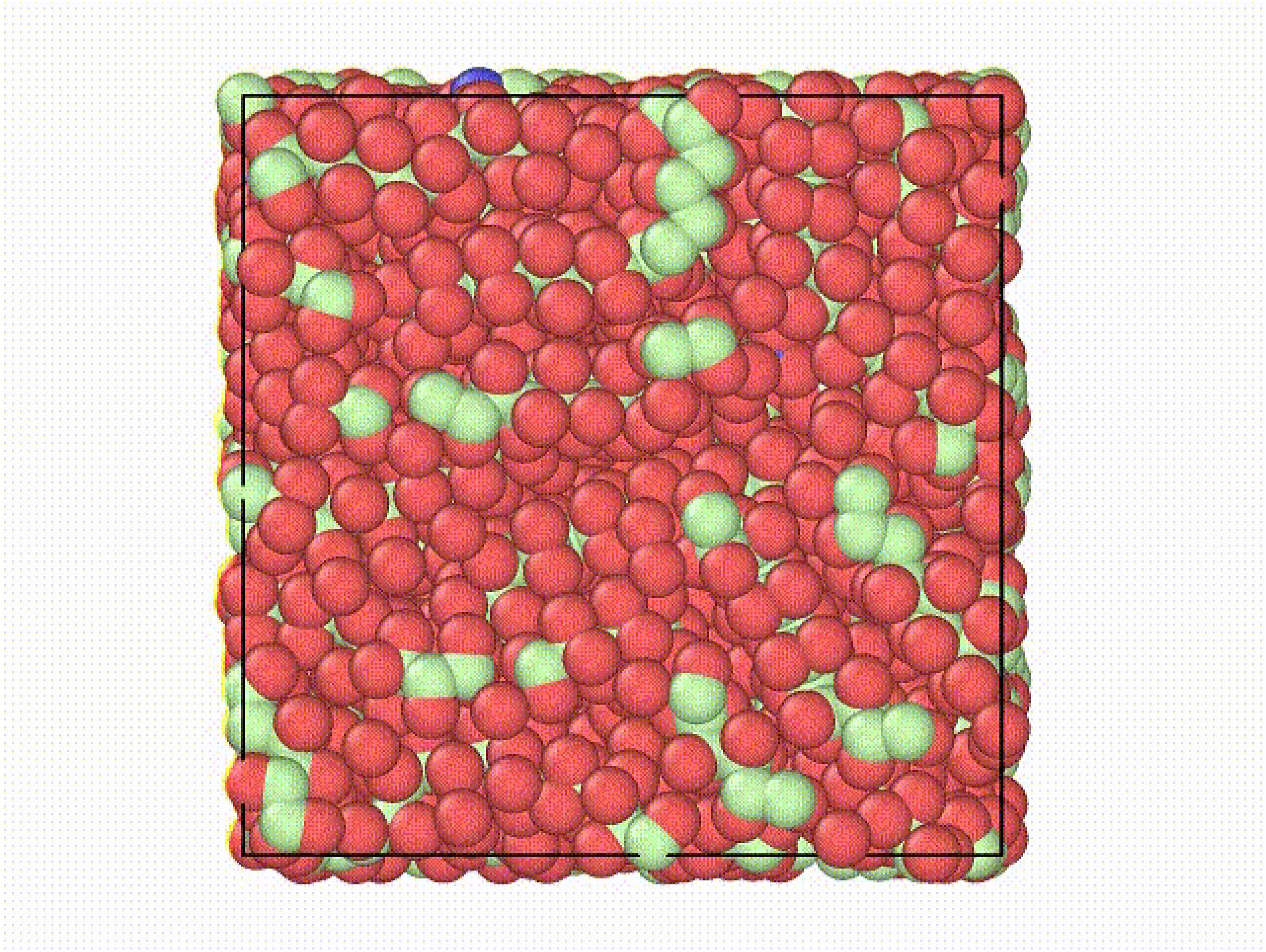


现代计算机模拟方法导论



介观动力学：相场法模拟雪花生长

现代计算机模拟方法导论



分子动力学：材料剪切

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

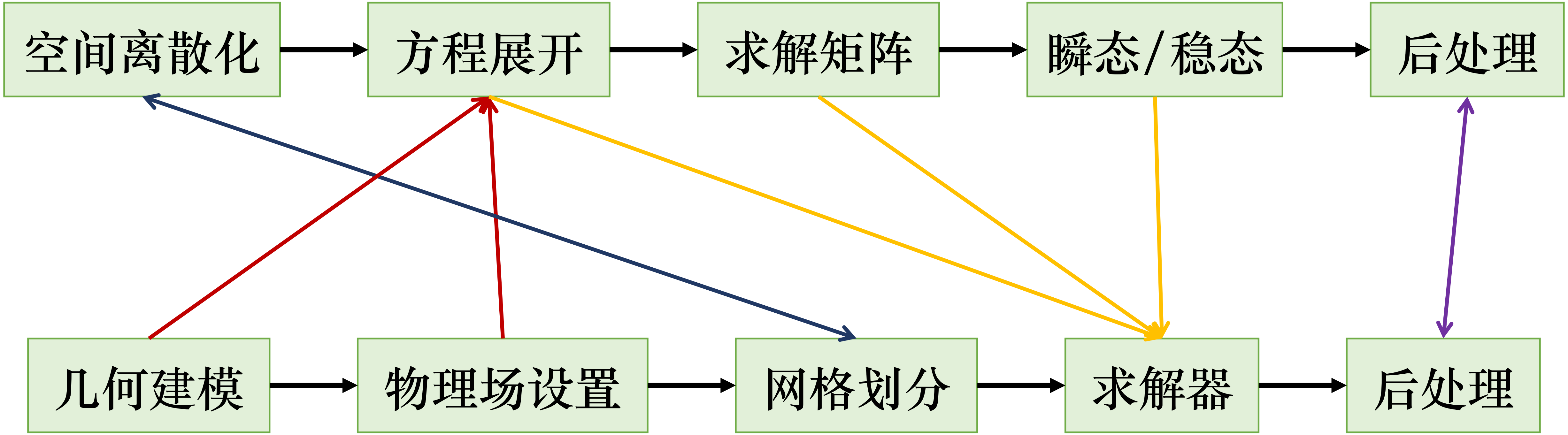
- ✔ 基于先进数值方法的通用仿真软件
- ✔ 支持单一物理场及多物理场耦合建模
- ✔ 同一界面中实现完整建模流程 - 从几何模型构建到结果后处理
- ✔ 提供便捷易用的仿真 App 创建、部署工具

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

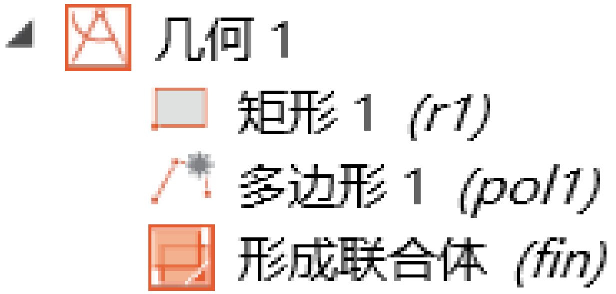


COMSOL Multiphysics®的一般流程

几何建模 → 物理场设置 → 网格划分 → 求解器 → 后处理

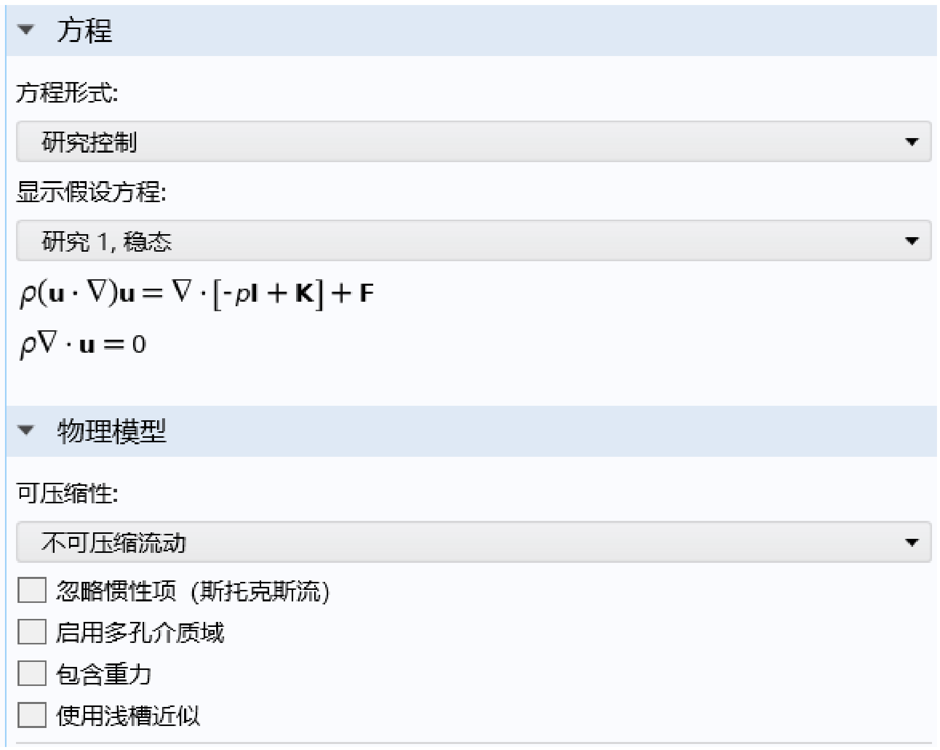
COMSOL Multiphysics®的一般流程

几何建模 → 物理场设置 → 网格划分 → 求解器 → 后处理



COMSOL Multiphysics®的一般流程

几何建模 → **物理场设置** → 网格划分 → 求解器 → 后处理



COMSOL Multiphysics®的一般流程

几何建模 → 物理场设置 → 网格划分 → 求解器 → 后处理

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
- 聚合物流动模块
- 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

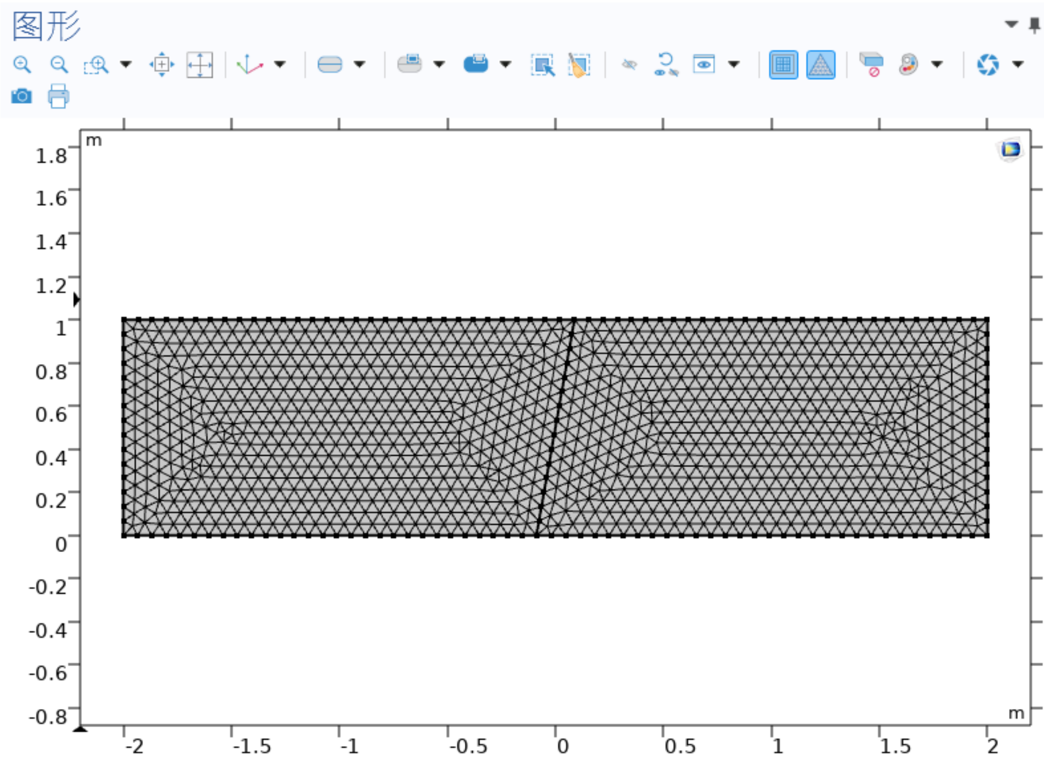
多功能

- 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

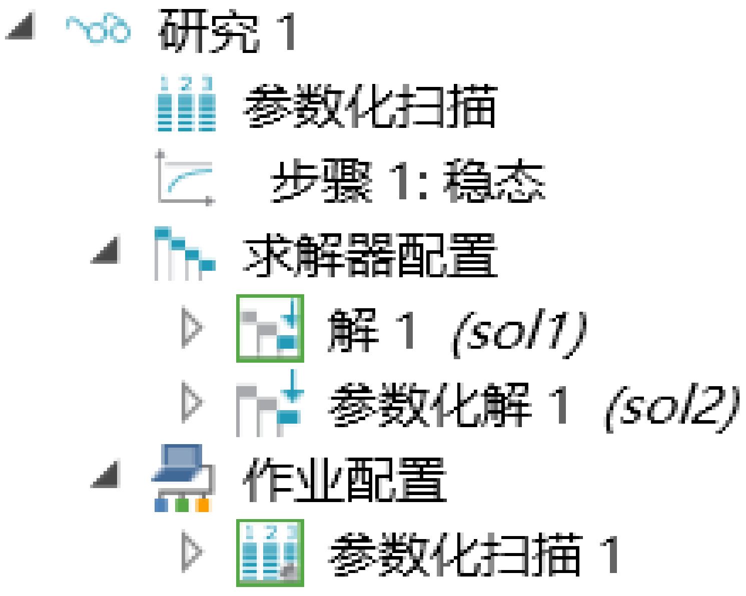
几何建模 → 物理场设置 → 网格划分 → 求解器 → 后处理

- 网格 1
  - 大小
  - 自由三角形网格 1



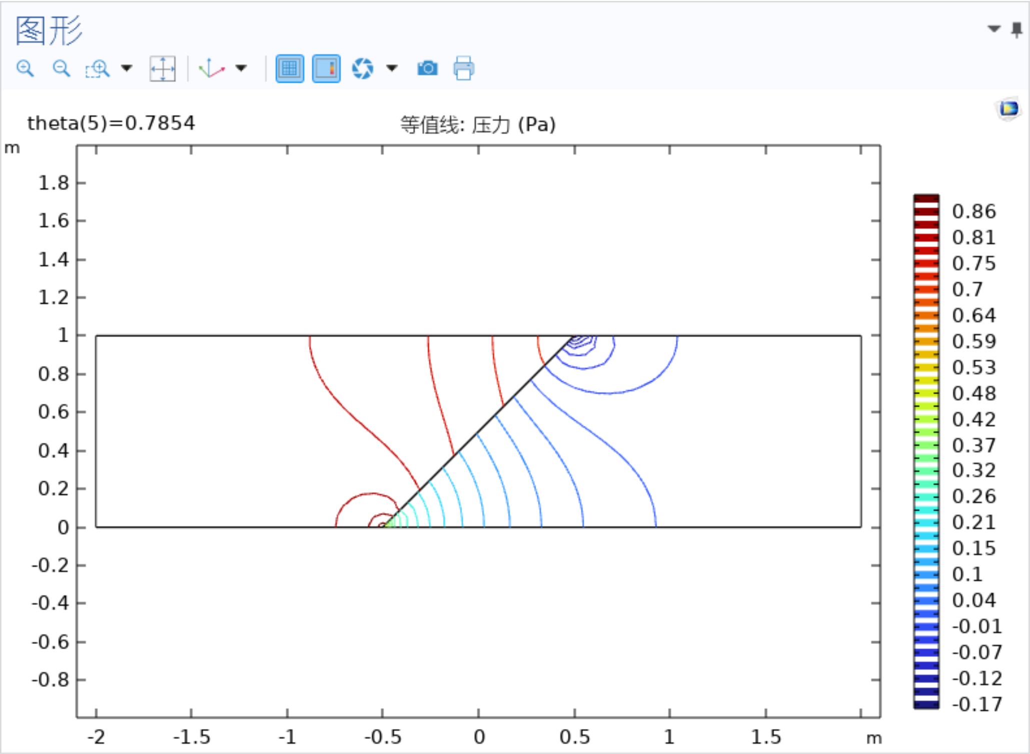
COMSOL Multiphysics®的一般流程

几何建模 → 物理场设置 → 网格划分 → 求解器 → 后处理



COMSOL Multiphysics®的一般流程

几何建模 → 物理场设置 → 网格划分 → 求解器 → 后处理



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……

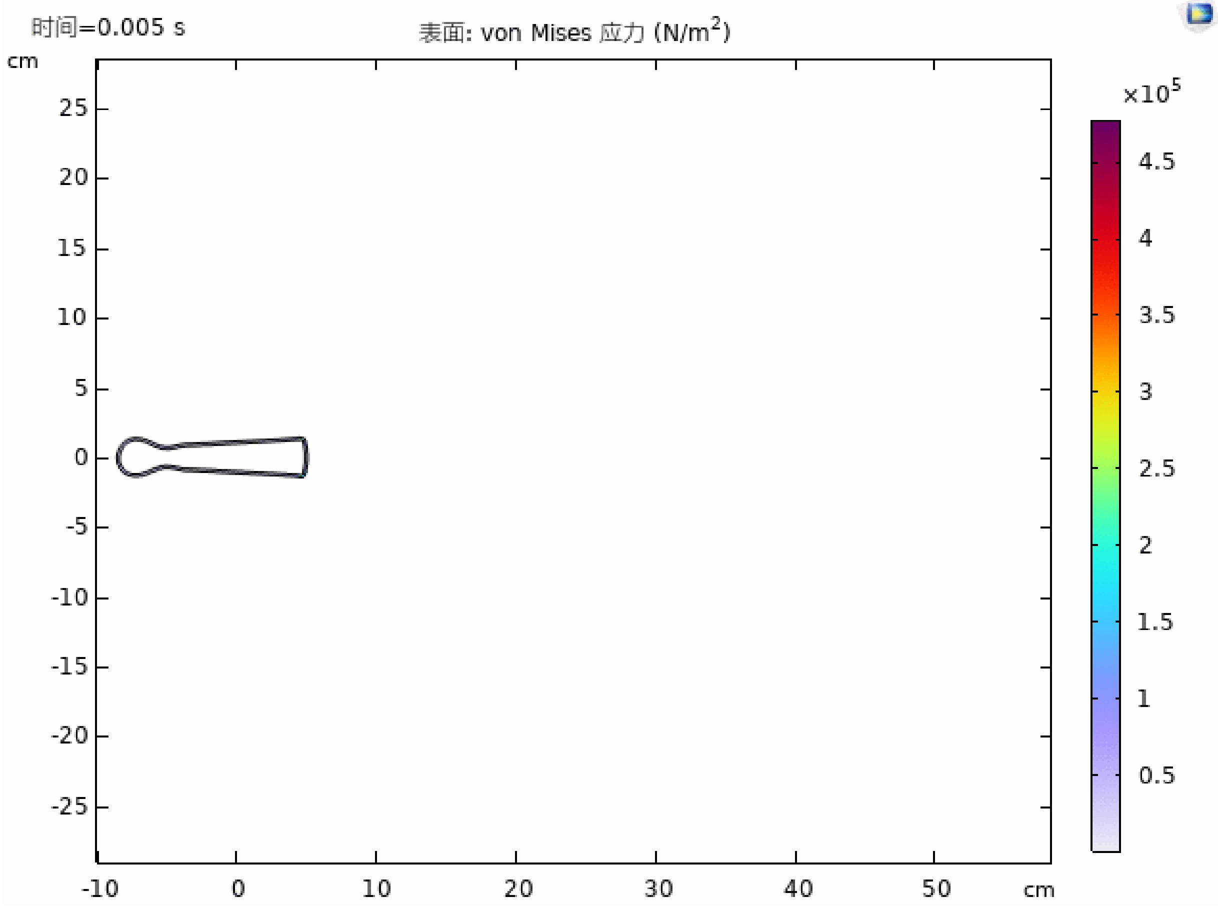
手把手案例

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。



自由提问时间

在线提问

讲座调查

THANKS

谢谢大家