

# COMSOL Multiphysics® Version 5.6

# COMSOL Multiphysics®

- COMSOL Multiphysics® 是一款拥有 50 个模块的强大仿真平台
- 34 个拥有专业的用户界面和工具的模块拓展了仿真平台的应用范围，包括优化、电气、机械、声学、传热、流体，以及化工
- 在核心产品和模块已经非常强大的材料定义功能上，我们又构建了一个综合性的材料库
- 14 个交互式产品使您能够将 COMSOL Multiphysics 仿真与工作簿、科学计算，CAD 以及 ECAD 联系起来
- COMSOL Compiler 是一个附加模块，可用于将 App 开发器创建的 App 编译为可独立执行的文件

# COMSOL® 软件 产品库

COMSOL  
MULTIPHYSICS®

理解、预测和优化工程  
设计的仿真建模平台

## 仿真 App 部署产品

- COMSOL Compiler™
- COMSOL Server™

编译、管理和部署  
仿真 App 的工具

## 附加产品

### 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

### 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

### 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

### 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
- 材料库
- 粒子追踪模块
- 气液属性模块

### 接口

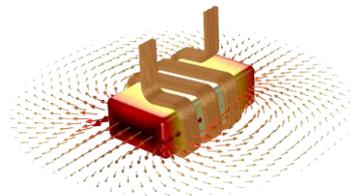
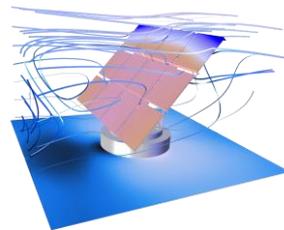
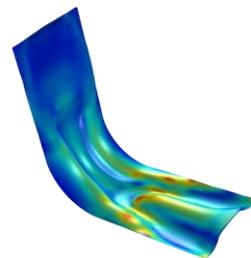
- LiveLink™ for MATLAB®
- LiveLink™ for Simulink®
- LiveLink™ for Excel®
- CAD 导入模块
- 设计模块
- ECAD 导入模块
- LiveLink™ for SOLIDWORKS®
- LiveLink™ for Inventor®
- LiveLink™ for AutoCAD®
- LiveLink™ for Revit®
- LiveLink™ for PTC® Creo® Parametric™
- LiveLink™ for PTC® Pro/ENGINEER®
- LiveLink™ for Solid Edge®
- File Import for CATIA® V5

# 核心产品

- COMSOL Multiphysics、所有的附加模块，以及绝大多数接口模块，都可以通过 COMSOL Server 许可证来运行 COMSOL App
- 以下详述 COMSOL Multiphysics® 核心产品的功能，以及与附加产品的比较
- 还将讨论 COMSOL Compiler™ 编译成的独立运行 App 的功能，以及通过 COMSOL Server™ 部署 App

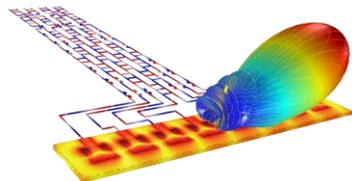
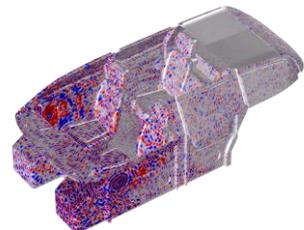
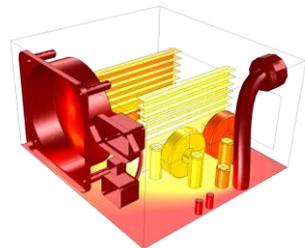
# 多物理场以及单物理场仿真平台

- 多物理场 —— 耦合现象
  - 两个或多个物理现象不受限制的互相影响
    - 怎样耦合
    - 多少耦合
- 单物理场
  - 一个集成环境 —— 不同的物理场与应用
  - 一开始可以先使用传热，接着是结构分析，再之后是流体，等等
  - 所有的建模都是同样的流程
  - 能够“开/关”物理场、求解器、网格设置，等等
- 能够在统一的仿真平台上进行跨学科产品开发



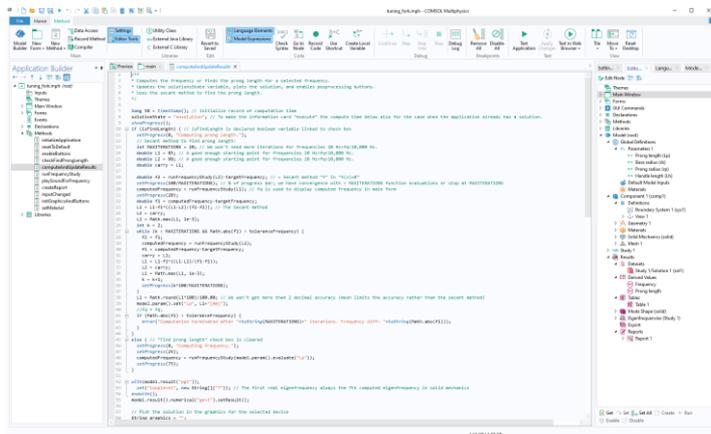
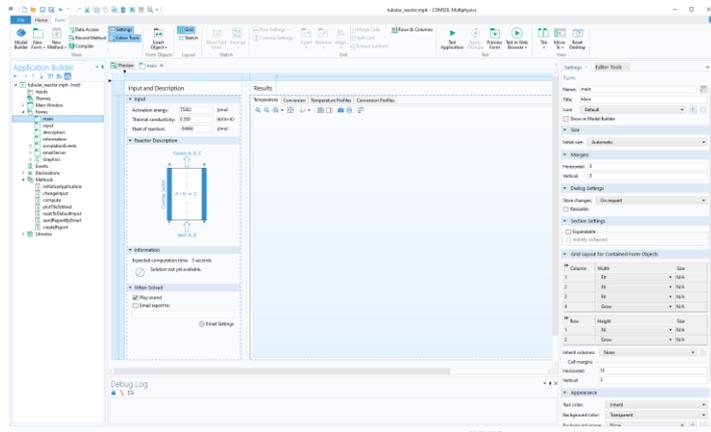
# 高度可定制性和适应性

- 创建您自己的多物理场耦合
- 定制材料属性和边界条件
  - 键入非线性表达式、查找表，或函数调用
- 求解用户自定义微分和代数方程的用户接口
  - 直接基于方程建模
- 为材料属性，边界条件，几何尺寸等设置参数化研究
- 高性能计算 (HPC)
  - 多核 & 多处理器：所有许可证类型
  - 集群 & 云：网络浮动许可证或 COMSOL Server 许可证



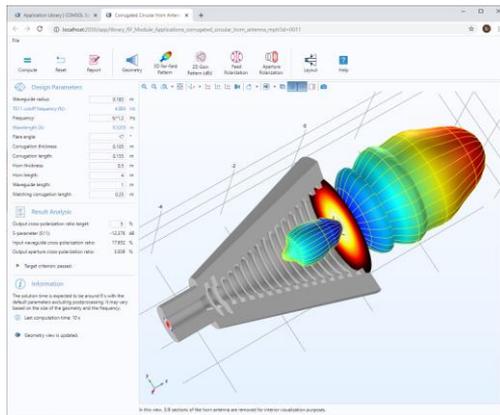
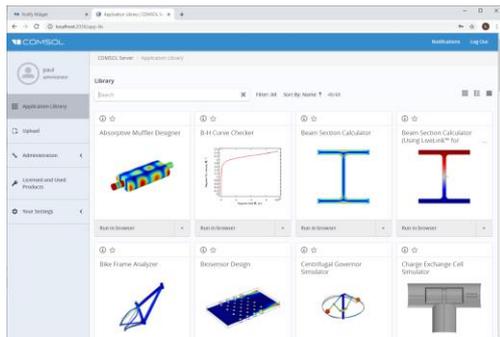
# App 开发器

- App 开发器包含在 Windows® 版本的 COMSOL Multiphysics® 基本模块
- 通过 COMSOL Multiphysics 模型创建仿真 App 或插件
- 包含表单编辑器和方法编辑器
  - 表单编辑器通过拖拽快速创建个性化的用户界面
  - 方法编辑器提供一个编程环境来编写特定的代码 (Java® 语法)
- 通过上述两个编辑器可以访问所有 COMSOL Multiphysics 功能



# COMSOL Server™

- COMSOL Server 许可证可以访问COMSOL Multiphysics、所有的附加模块，以及LiveLink™ 产品
- 用来部署 COMSOL App
  - 内网和外网
  - 供同事，客户和供应商全球访问
- 允许 App 用以下方式运行
  - 连接到 COMSOL Server™
    - 主流的浏览器
    - Windows® 平台的 COMSOL® Client
    - Android® 平台的 COMSOL® Client



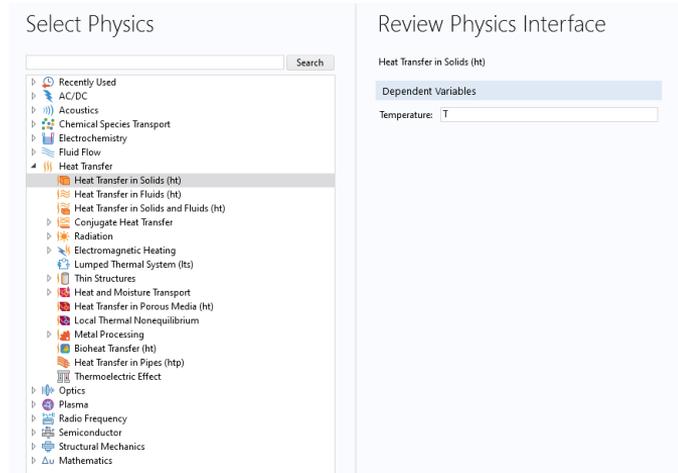
# COMSOL Compiler™

- 将 App 开发器创建的 App 编译为可以独立运行的应用程序
- 可以编译为以下各种平台的版本：Windows®、Linux®、macOS
- 可以独立运行编译好的应用程序
  - 无需 COMSOL Multiphysics 或 COMSOL Server 许可证
- 为了编译应用程序
  - 需要 NSL、CPU 或者 FNL 类型的 COMSOL Compiler 许可证

# 模型向导

# 模型向导

- 在开始建模的流程中，模型向导通过一个包含所有物理场的树形列表帮助您选择正确的物理场
- 可使用的物理场接口取决于安装的许可证以及选择的空间维度
- 可选择三维、二维轴对称、二维、一维轴对称、一维或零维
- 在后续的建模操作中，COMSOL Desktop® 的建模环境允许您自由地将模型与不同维度的方程和物理场耦合

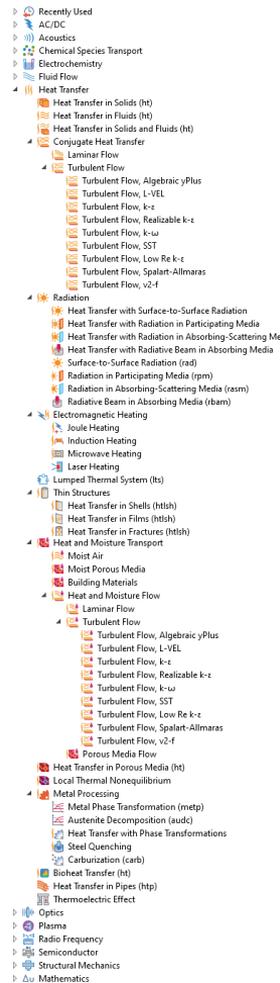


# 物理场接口

- COMSOL Multiphysics 以及物理场模块包含它们所支持的物理场接口
- 物理场接口是专业的用户界面 (UI) ， 包含了特定领域的物理场， 例如， 固体力学， 层流， 固体传热以及静电， 等等
- 物理场接口同时也包含有特定的， 研究/求解器类型， 以及分析， 可视化， 以及后处理工具来明确所模拟的物理场
- 在 COMSOL Multiphysics 核心模块中给出了一系列基本的物理场接口
- 附加模块包含有额外的以及更加专业的物理场接口

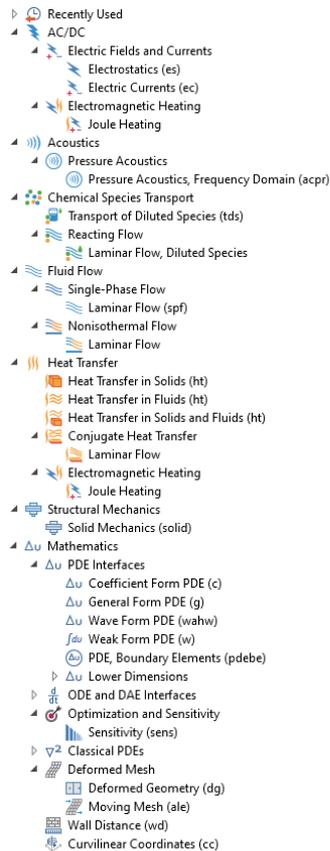
# 物理场接口-所有模块

- 模型向导中不同的物理场接口按领域排列，如 AC/DC、流体，传热以及结构力学
- 右图的传热分支展开可见到所有的传热物理场接口
- 模型向导中不同的分支显示了不同的附加产品
  - 他们被安排在相应的物理分支下
- 当额外的附加模块被安装后，树中会显示更多的物理场接口
  - 可选的边界条件，以及建模工具可能在特定的附加模块中可见
- 完整的许可证和对应的物理场接口列表，可查阅
  - <https://cn.comsol.com/products/specifications/>



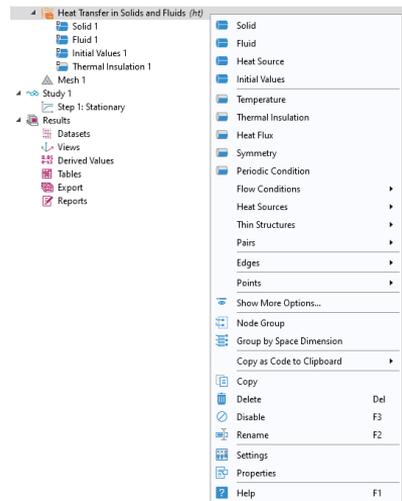
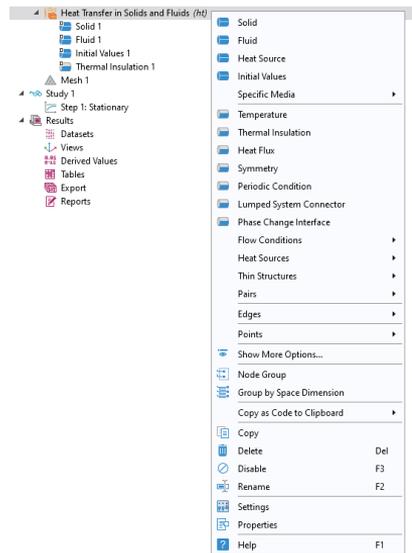
# 物理场接口——核心产品

- 右图显示了核心产品中的物理场接口
- 每一个核心产品中的物理场接口在一个或多个附加模块中有更多高级选项
- 数学接口包含在核心产品中
- 优化接口需要优化模块许可证



# 物理场接口 —— 模型设置

- 核心产品的物理场接口只包含基本材料、域、以及边界条件设定
- 右图显示了流体传热在传热模块（左）以及核心产品（右）中的不同
- 传热模块对于定义物理场给了更多选项和设置
  - 开放边界、热通量流入、热接触、....
- 与核心产品中的其他物理场接口类似
  - 更高级的版本在附加模块中可以获得



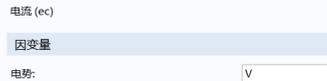
# 多物理场

- 可以使用“模型向导”选择多个物理场接口实现多物理场耦合
- 对于常见的耦合，目前有已经可用的多物理场接口，例如焦耳热
- 焦耳热（在核心模块中）是一个耦合接口，包含了电流、固体传热，以及一个多物理场节点
- 附加模块提供了很多预设好的多物理场接口

选择物理场



检查物理场接口



# 研究

- “模型向导”也会帮助您为您的物理场或多物理场耦合选择研究
- 一个研究节点包含有一个求解器或一系列求解器来适应所选择的物理场
- 在后续的建模流程中 COMSOL Desktop 环境允许您改变和优化求解器设置

## 选择研究



# COMSOL Desktop®

# COMSOL Desktop®

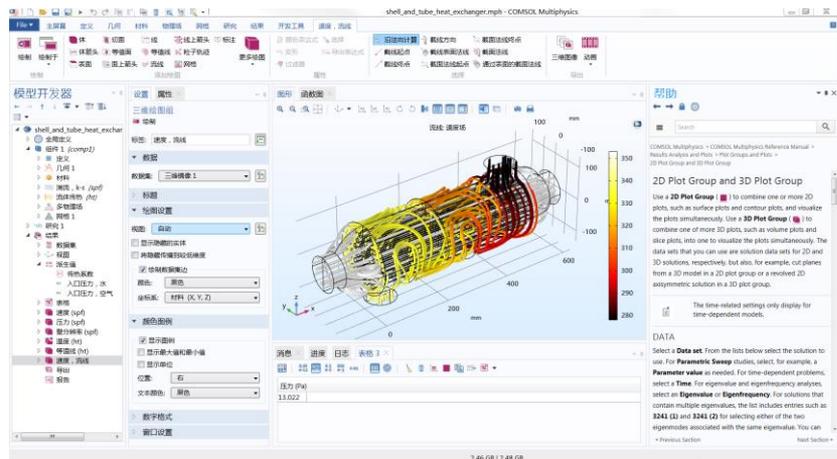
- COMSOL Desktop® 提供了一个集成的仿真环境，可用于创建所有的 COMSOL Multiphysics® 仿真任务

- 模型开发器

- 几何建模及 CAD 导入
- 网格划分
- 设置材料及物理场
- 求解
- 可视化
- 后处理

- App 开发器

- 表单编辑器
- 方法编辑器



# 文档和案例

## 文档集

- COMSOL Multiphysics 核心模块以及附加模块提供了 PDF 和 HTML 格式的文档

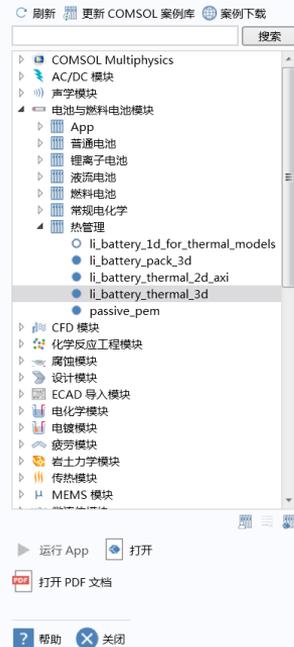
## 动态帮助

- 帮助窗口提供了相关帮助文本关于窗口和模型树节点

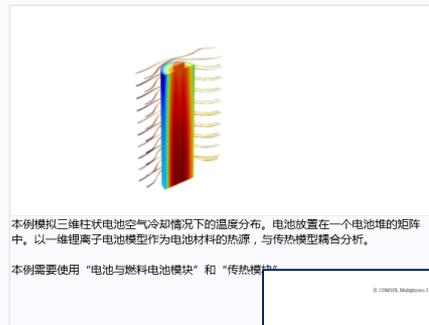
## 案例库

- 案例库是 MPH 文件的集合，里面同时包含了理论背景以及对模型和 App 逐步建模的指导
- 可以使用逐步指导和mph模型作为模板来开发您自己的模型和 App

### 案例库



### 三维柱状锂离子电池的热建模



本例模拟三维柱状电池空气冷却情况下的温度分布。电池放置在一个电池堆的矩阵中。以一维锂离子电池模型作为电池材料的热源，与传热模型耦合分析。

本例需要使用“电池与燃料电池模块”和“传热模块”。

名称	li_battery_thermal_3d
使用的产品	• COMSOL Multiphysics 和 • 电池与燃料电池模块 和 • 或 CFD 模块 或 传热模块
物理场接口	传热 层流 锂离子电池
创建版本	COMSOL Multiphysics 5.3a (R)
计算时间	13 分钟, 38 秒
作者	COMSOL
上次修改时间	2017-11-11 6:17:55
创建时间	2017-11-11 6:17:55



# 参数化和相关模型

- COMSOL 在模型树中创建了操作序列，记录所有的步骤，包括创建几何、划分网格、研究和求解器设置、后处理，等
- 模型可以是参数化形式：几何、网格、物理场设置，后处理，等等
- 几何和仿真设置之间完全关联——几何中的修改将会自动扩展到整个模型
- 可以通过代数关系控制参数

设置

参数

标签: 参数 1

参数

名称	表达式	值	描述
d	3[um]	3E-6 m	热臂高度
dw	15[um]	1.5E-5 m	冷臂高度
gap	3[um]	3E-6 m	臂间距
wb	10[um]	1E-5 m	基座宽度
wv	25[um]	2.5E-5 m	热臂的长度差
L	240[um]	2.4E-4 m	执行器长度
L1	L-wb	2.3E-4 m	最长热臂的长度
L2	L-wb-wv	2.05E-4 m	最短热臂的长度
L3	$L-2*wb-wv-L/48-L/6$	1.5E-4 m	冷臂长度，厚部分
L4	L/6	4E-5 m	冷臂长度，薄部分
htc_s	$0.04[W/(m^2K)]/2[um]$	20000 W/(m...)	传热系数
htc_us	$0.04[W/(m^2K)]/100[um]$	400 W/(m^2·K)	传热系数，上表面
DV	5[V]	5 V	外加电压
alphaps	$2.6e-6[1/K]$	2.6E-6 1/K	热膨胀系数
T0	293.15[K]	293.15 K	应变参考温度
noa	3	3	臂数量

名称: L3

表达式:  $L-2*wb-wv-L/48-L/6$

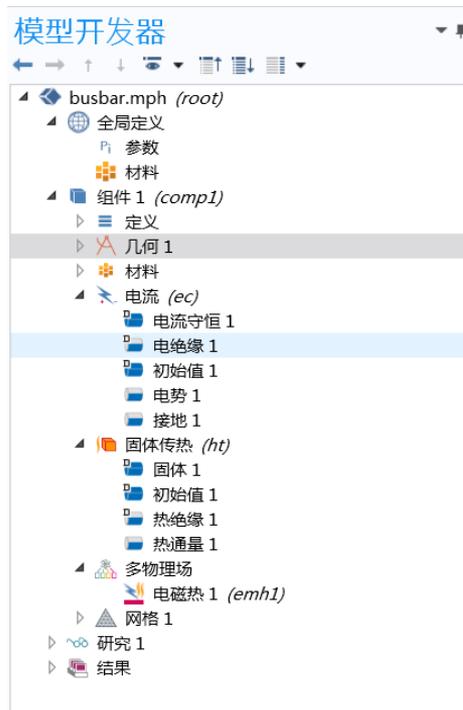
描述: 冷臂长度，厚部分

可见性

显示在参数选择中

# 模型树

- 模型开发器窗口包含有模型树，提供了整个模型的概况以及所有的开发，求解模型和后处理结果所需要的功能
- 图片显示了焦耳热多物理场耦合接口的模型树
- 多物理场节点包含了焦耳热所必要的耦合



# 变量，表达式，方程以及查找表

- COMSOL Desktop 包含了内置的数学表达式编译器
  - 表达式能够被分配给任意的变量以用于后续使用与材料属性，边界条件或源
  - 坐标变量  $x$ ,  $y$  和  $z$  能够被用于定义空间变量，例如，分布载荷
  - 小写字母  $t$ ，被保留用作时间变量，并能够被用于表达时间变化的脉冲的瞬态模拟
- 算子包括平滑，线性，微分以及更多操作
- 有内置的方程模板，例如，高斯以及方波脉冲
- 直接在 COMSOL Desktop 定义查找表方程或从文件中导入
  - 作为可编辑的数值表，能够使用不同格式的图形数据作为插值方程的基础

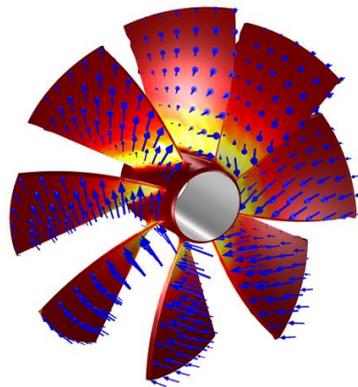
名称	表达式	单位	描述
alpha	ht.alpha12		液相分数
f	(1-alpha)^2/(alpha^3+e...		体积力预因子
Fr	-f*A_mush*u	N/m <sup>2</sup>	体积力密度, r 分量
Fz	-f*A_mush*(w-v_cast)	N/m <sup>2</sup>	体积力密度, z 分量
D	d(alpha,T)	1/K	温度依赖性, 潜热



# 数据导入

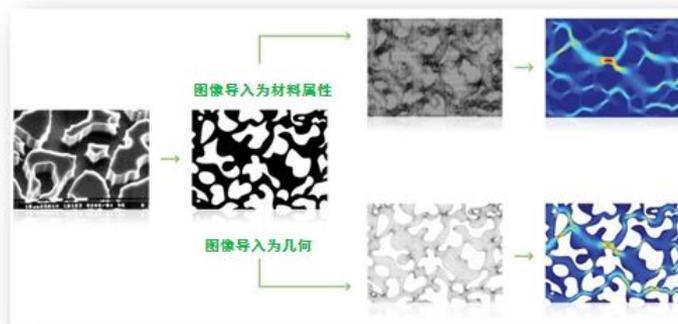
- 能够在定义函数时以一个或两个输入变量的形式导入数据文本文档或 Excel® 表
- 引用导入数据的函数能够用于材料属性, 载荷, 源或后处理比较
- 图形显示了基于导入的数据文件的一个方程定义的空间分布载荷
- 导入数据集能够映射到点, 边, 面或体

```
%X      Y      Z      VectorX  VectorY  VectorZ
-0.03041 0.013353 0.138253 0.001493 0.003518 -0.00302
-0.03862 0.01627 0.137537 0.001332 0.003
-0.0355 0.010981 0.132823 9.60E-04 0.00
```



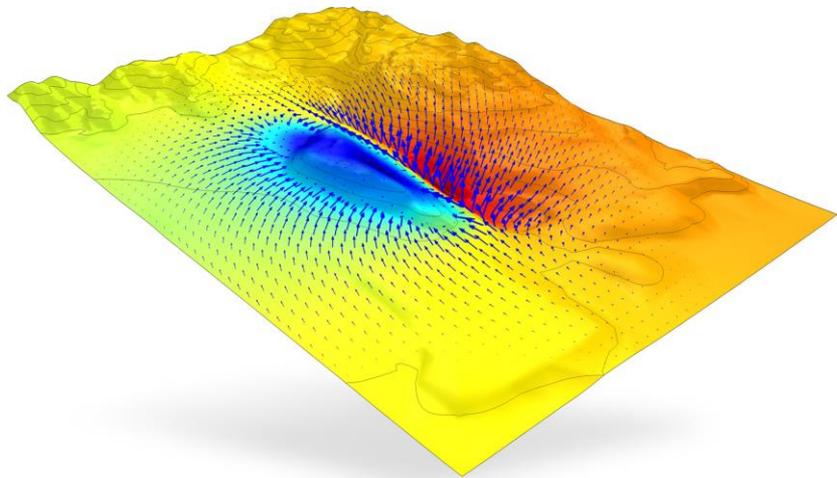
# 图像导入

- 使用图像数据表征 2D 材料分布，或使用不同的颜色或灰度区分不同的材料区域
  - 用于计算高度不均匀或多孔介质材料的等效的体积平均
  - 避免图像分解和图像到几何的转化
  - 极度简化的网格
- 导入的图像通过插值函数处理可用于任意建模目的
- 格式：JPEG、BMP、PNG、GIF



# 数字高程图 (DEM) 导入

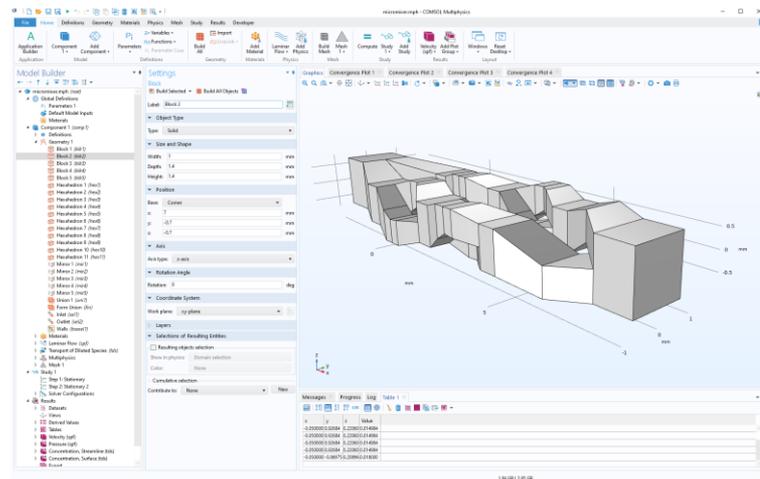
- 地理信息系统 (GIS) 的拓扑图像数据能够通过直接支持美国地理调查局 (USGS) 的 DEM 文件格式的数字高程图插值函数特征导入
  - 能够将 DEM 表面与不同的固体结合来形成一个能代表几何和网格的体
  - 多张 DEM 表面能够相互结合或重叠, 或者嵌入其他地理对象中组成结构
- 右图显示了一个铁矿沉积带附近的磁场分布, 应用于磁场方向的地理探测



# 几何与网格

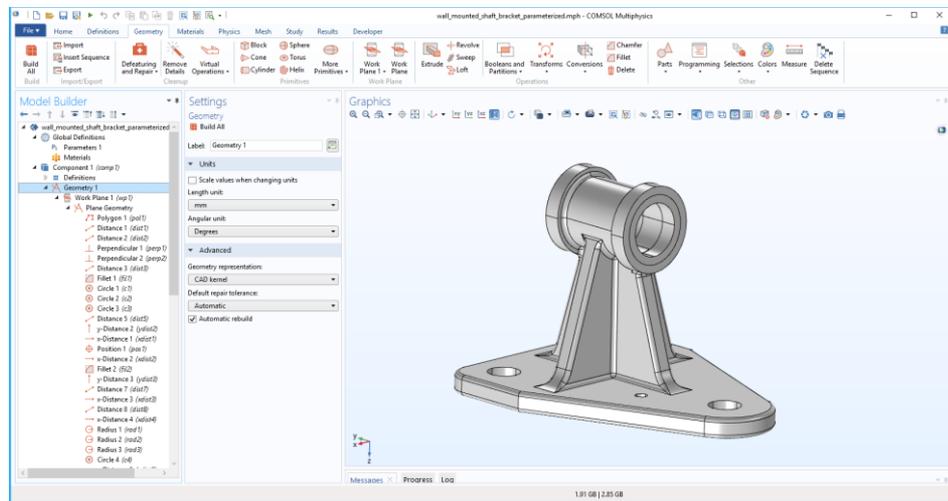
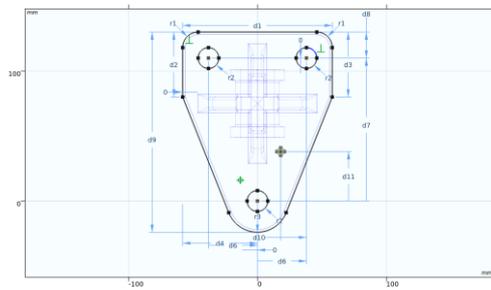
# 几何建模 —— 核心产品

- 核心产品包含有 3D、2D 和 1D 的几何建模工具
- 混合模型建模：自由组合的固体，表面，曲线和点
- 布尔操作：并集，交集，差集
- 从工作平面上拉伸和旋转 2D 几何

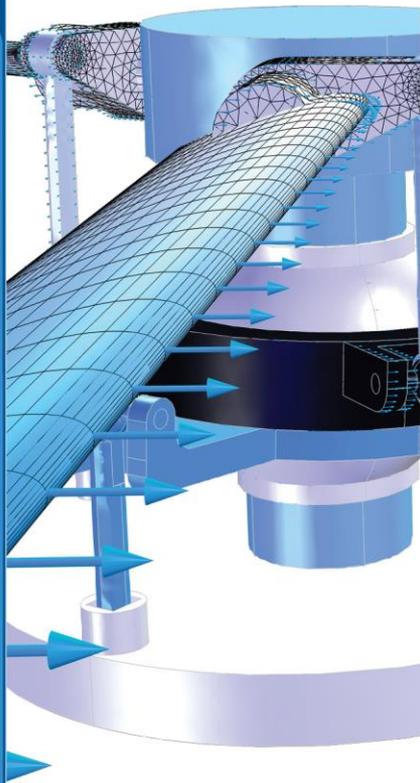


# 几何建模 —— 附加模块

- 一些交互式附加模块显著地拓展了核心模块的几何建模能力
- 设计模块中的几何建模工具支持放样, 3D 圆角, 倒角, 截取中面, 加厚, 以及 CAD 导入和几何修复
- CAD 导入模块包含了设计模块中几何建模能力的子集
- CAD LiveLink™ 产品包含了 CAD 导入模块的所有功能



# CAD 接口和网格



## COMSOL MULTIPHYSICS®, COMSOL SERVER™, & STANDALONE APPLICATIONS

### LIVELINK™ INTERFACES

- ↔ LiveLink™ for AutoCAD®
- ↔ LiveLink™ for Inventor®
- ↔ LiveLink™ for PTC® Creo® Parametric™
- ↔ LiveLink™ for PTC® Pro/ENGINEER®
- ↔ LiveLink™ for Revit®
- ↔ LiveLink™ for SOLIDWORKS®
- ↔ LiveLink™ for Solid Edge®

### MESH FILE FORMATS

- ↔ 3MF
- ↔ NASTRAN®
- ↔ PLY
- ↔ STL
- ← VRML

### 2D CAD FILE FORMATS

- ↔ DXF™

### 3D CAD FILE FORMATS

- ↔ ACIS®
- ← AutoCAD®
- ← CATIA® V5 <sup>1</sup>
- ↔ IGES
- ← Inventor®
- ← NX™
- ↔ Parasolid®
- ← PTC® Creo® Parametric™
- ← PTC® Pro/ENGINEER®
- ← SOLIDWORKS®
- ↔ STEP

### OTHER PRODUCTS

- ← Mimics®
- ← Simpleware

### ECAD FILE FORMATS

- ← GDSII
- ← IPC-2581
- ← ODB++

### GEOGRAPHIC INFORMATION SYSTEM (GIS)

- ← Digital Elevation Map (DEM)

**KEY** ↔ ASSOCIATIVE READ & MODIFY    ↔ READ AND WRITE    ← READ

<sup>1</sup> Not supported with COMSOL Compiler™

Support for implementation of the ODB++ Format was provided by Mentor Graphics pursuant to the ODB++ Solutions Development Partnership General Terms and Conditions ([www.odb-sa.com](http://www.odb-sa.com)).

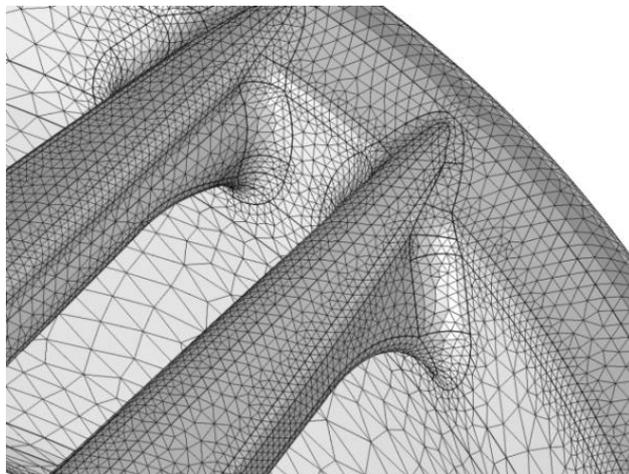
For trademark ownership, see [www.comsol.com/trademarks](http://www.comsol.com/trademarks).

# 核心产品中CAD 和网格兼容性

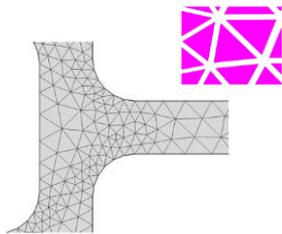
文件格式	拓展名	作为几何模型	作为网格	导入	导出	备注
COMSOL 原生格式	.mphbin, .mphtxt	是	是	是	是	COMSOL Multiphysics 原生的几何与网格二进制和文本格式
NASTRAN®	.nas, .bdf, .nastran, .dat	否	是	是	是	对于网格导入, NASTRAN® 数据集格式是首选, 因为其导入的是体网格, 能够被用于 COMSOL Multiphysics。 导入的网格能够在域与面层次上被自动拆分。
VRML, v1	.vrmf, .wrl	是	是	是	否	通过 COMSOL Multiphysics 网格划分工具导入后能够创建为三维网格。
STL, PLY, 3MF	.stl, .ply, .3mf	是	是	是	是	通过 COMSOL Multiphysics 网格划分工具导入后能够创建为三维网格。
DXF (2D)	.dxf	是	否	是	是	多个 DXF 文件能够被导入和拉伸成三维结构, 三维 DXF 文件能够通过 CAD 模块导入。
DEM	.dem	是	否	是	否	DEM 导入能够创建一个插值表, 用于形成参数化表面

# 网格划分

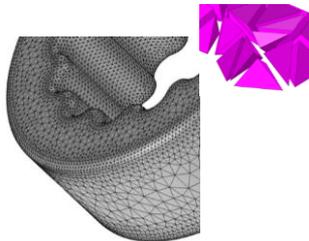
- 网格划分功能包含在核心模块中
- 可选择自动四边形网格划分或手动覆盖设置
- 半自动扫掠网格和映射网格
- CFD 边界层网格
- 内置的自适应网格和用户定义误差估算
- 任意拉格朗日-欧拉 (ALE) 的移动网格



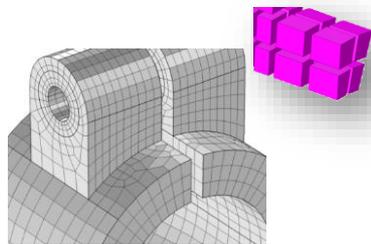
# 网格单元类型



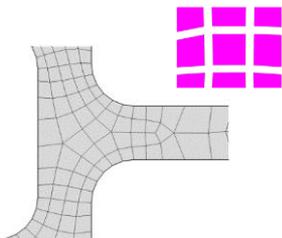
三角形



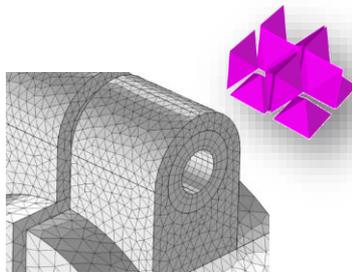
四面体



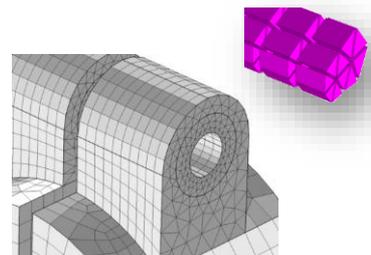
六面体



四边形网格



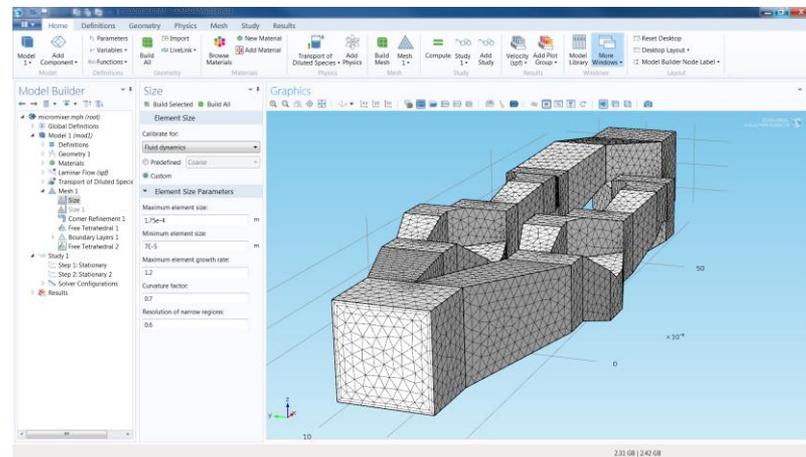
金字塔网格



棱柱网格

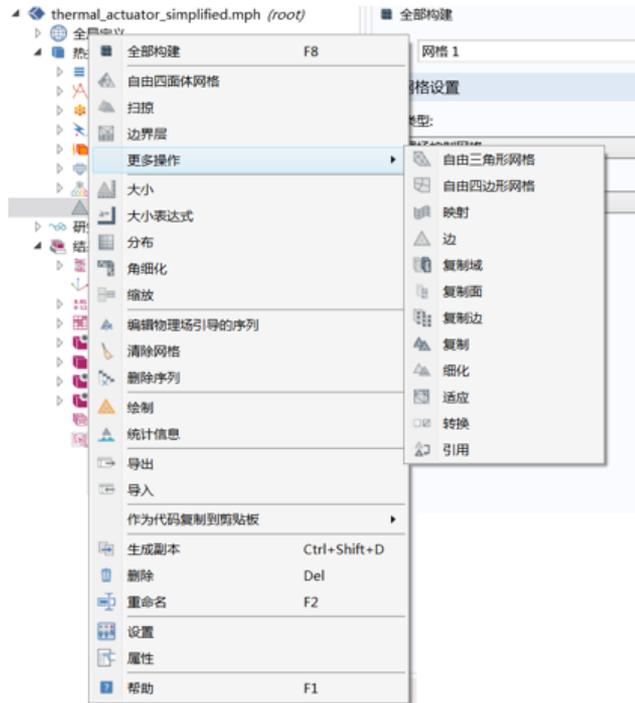
# 基于物理场划分网格

- 对于一些物理场接口，自动网格划分将网格密度与类型与边界条件相适应
- 图片展示 CFD 仿真中应用的自动创建的混合网格，其中包含有靠近壁面的四棱柱边界层网格和四面体网格



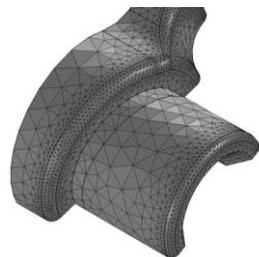
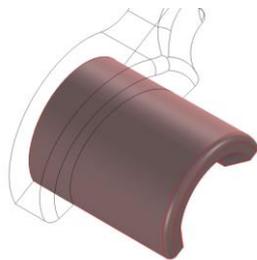
# 用户控制网格划分

- 手动添加网格操作以生成网格
- 网格操作被保存在网格序列中，使你能够“编程”网格划分工具
- 在不同层级上手动控制网格尺寸
  - 域 (体)
  - 边界
  - 边
  - 点/顶点
- 网格参数能够被参数化
  - 使用带变量的表达式来定义网格尺寸参数
- 自动重生网格可用于几何参数化扫描
- 可以使用数学表达式控制网格密度



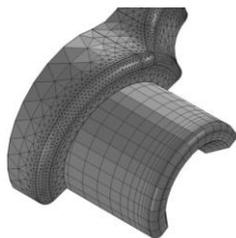
# 划分局部网格 (装配体)

- 能够创建连续的网格, 并保持区域的分离 (部件相互接触)

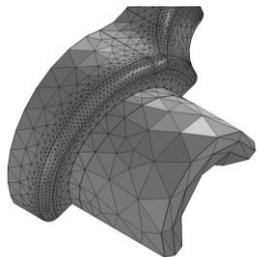


连续网格

- 能够将零部件在接触面上独立地划分为兼容或不兼容的网格



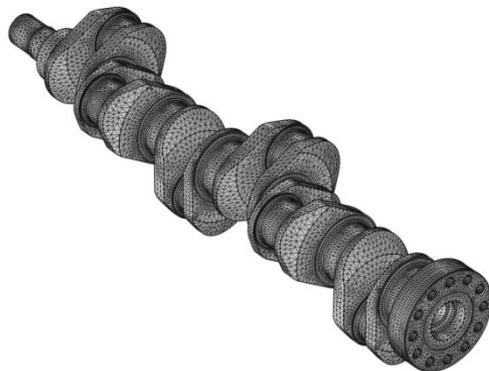
不兼容网格



兼容网格

# 导入 NASTRAN® 网格

- 导入体/固体和面/壳网格
- 将平面网格导入为二维网格
- 导入网格和材料
- 自动根据材料数据进行分割域
- 自动根据单元类型分割域
- 自动或手动控制参数来进行面分割
- 导入/导出 .nas、.nastran、.bdf, .dat 格式



导入曲轴的 NASTRAN® 网格

# 导出 NASTRAN® 网格

- 体/固体和表/壳网格
- 导出二维和三维网格
- 导出域和边界单元
- 包含几何实体的编号，以及二阶单元信息

The image shows a software dialog box titled "导出" (Export) with a sub-section for "网格" (Mesh). The "全部构建" (All) option is selected. Under the "导出" (Export) section, the "文件类型:" (File type) is set to "NASTRAN 文件" (NASTRAN file). The "文件名:" (File name) field is empty. There are "浏览..." (Browse...) and "导出" (Export) buttons. The "要导出的数据" (Data to export) section has three checked options: "域单元" (Domain elements), "几何实体信息" (Geometric entity information), and "边界元" (Boundary elements). The "输出设置" (Output settings) section has the "字段格式:" (Field format) set to "小" (Small). The "导出为线性单元" (Export as linear elements) option is unchecked.

导出

网格

全部构建

导出

文件类型:

NASTRAN 文件

文件名:

浏览... 导出

要导出的数据

域单元

边界元

几何实体信息

输出设置

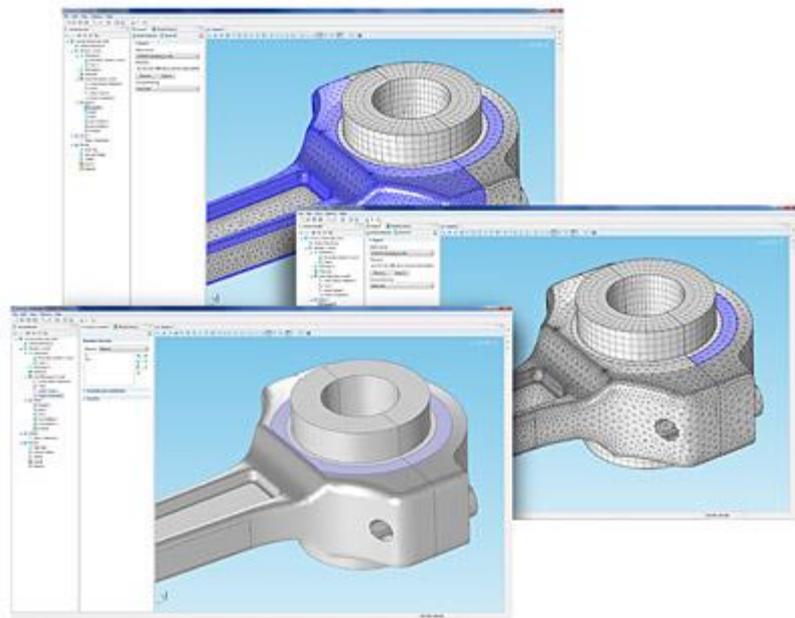
字段格式:

小

导出为线性单元

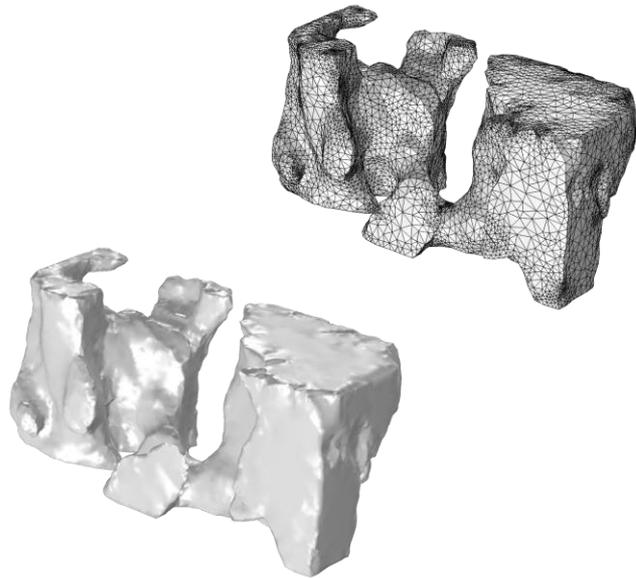
# 分割导入的网格

- 在导入的网格上创建新的边界条件和域来分配边界条件和材料属性
- 可以通过下列操作将已存在的网格元素进行分组
  - 球体
  - 立方体
  - 圆柱体
  - 合并体
  - 删除体
  - 创建顶点
  - 面检测
    - 自动分割长尖脊形和平区域的边界
  - 逻辑表达式，基于以下条件进行分割
    - 网格类型
    - 元素数目
    - 坐标



# STL、PLY 和 3MF 导入

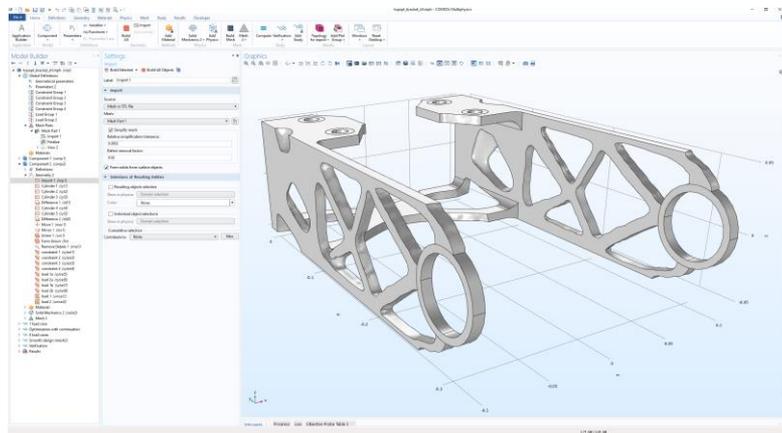
- 将导入的 STL、PLY 或 3MF 面网格转化为几何对象
- 自动简化和移除细节
- 使用几何操作创建围绕导入网格的体，例如，用于流动或电磁场仿真的域
- 也可以用于 NASTRAN® 网格导入
- 可以直接从导入的面网格创建体网格



通过 STL 面网格导入的锂离子电池的纳米显微图像，  
转化为固体几何对象

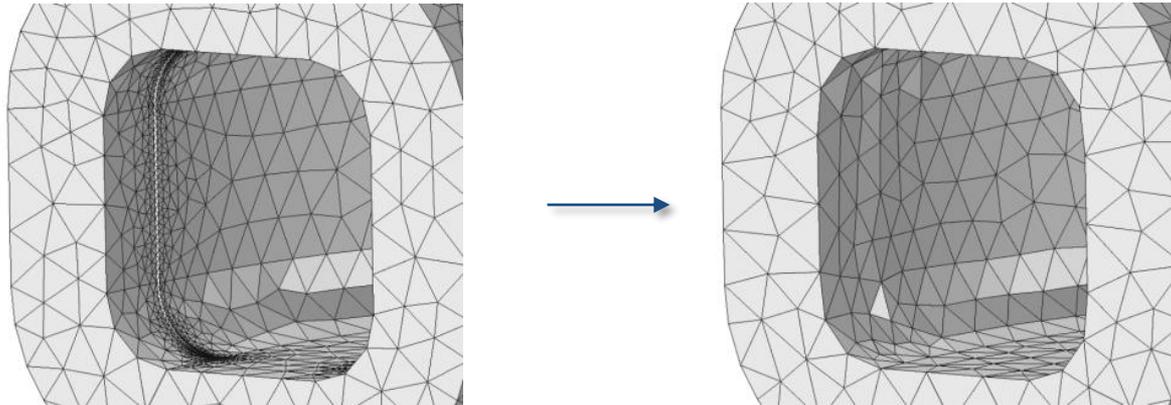
# STL、PLY 和 3MF 导出

- 将几何、网格或者变形网格的三角形面网格导出为 STL、PLY 或 3MF 格式的网格文件
- 将三维体、面、切面、多切面、等值面，或者远场图的几何形状信息导出为 STL、PLY 或 3MF 文件
- 在 COMSOL Multiphysics 或专门的 CAD 软件中基于导出的面网格创建或修改几何设计
- 导出包含场数据的 PLY 和 3MF 文件，在其他软件中通过颜色进行显示或者用于 3D 打印



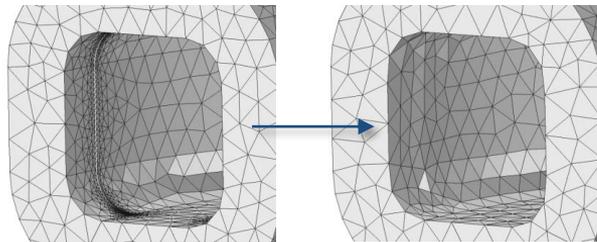
经过优化所得到的这种形状的结构支架可以导出为 STL 文件，随后可以作为几何文件导入后进行后续分析。（拓扑优化需要优化模块）

# 虚拟几何与网格控制操作



# 虚拟几何操作

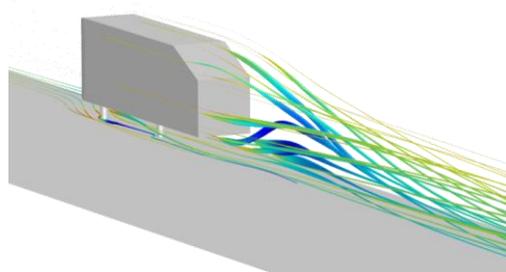
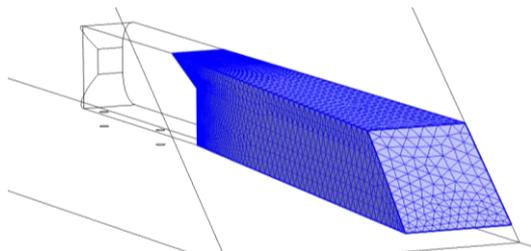
- 自动删除几何细节，以便进行网格划分
- 全面的削除特征和修复操作
- 对网格划分工具“隐藏”几何特征
- 用于削除
  - 长条面
  - 短边
  - 小面
  - 不想要的面分离
  - 由于固体重叠导致的小的域
- 与削除特征不同之处
  - 作用在网格划分所识别的定型几何上
  - 保留了底层的面曲率



# 网格控制操作

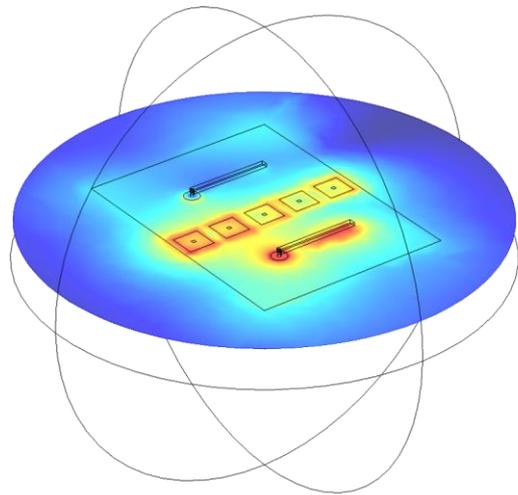
- 在已知的快速变化或陡峭梯度区域上获取精确的网格分布和密度控制，这种情况常发生在 CFD 建模
- 选择的几何特征只对控制的局部网格特性有效，而不会在进行物理设置时影响求解域的边，面或域

网格控制的域划分在汽车型物体周围湍流建模的应用



# 形函数和离散化

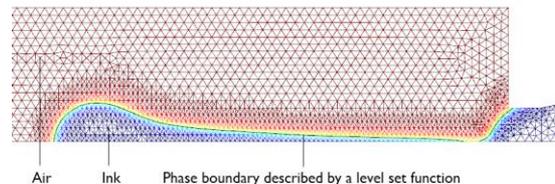
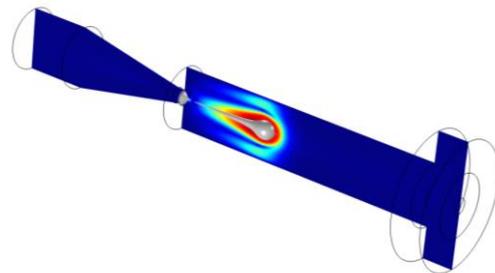
- 自动或手动选择形函数和元素阶次
- 可用的形函数包括
  - 拉格朗日
  - 厄米特
  - 阿基里斯
  - 间断拉格朗日
  - 旋度 (向量/边)
- 自动或手动选择几何离散化形阶次—使弯曲的单元与几何形状相适应
- 主要基于有限元法 (FEM)
- 对一些专用附加模块也有: 有限体积法 (FVM), 边界元法 (BEM), 粒子追踪, 以及射线追踪方法



使用旋度单元的电磁波接口模拟的天线模型。  
需要 RF 模块。

# 自适应网格细化

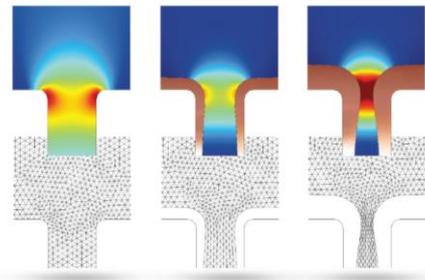
- 通过网格对物理行为的自适应来提高解的精确度
- 求解器根据误差判据来细化网格，最小化误差
- 对稳态，特征值，特征频率或瞬态研究都适用



瞬态自适应网格帮助下完成的喷嘴喷出墨滴的建模

# 变形几何

- 通过网格移动研究了当物体发生变形时的表现
- 对原有几何增加或减少材料的过程进行建模，例如：电化学抛光或电镀
- 进行优化和灵敏度分析
- 核心模块具有的功能
- 附加模块中基于应用的接口进一步扩展这个功能



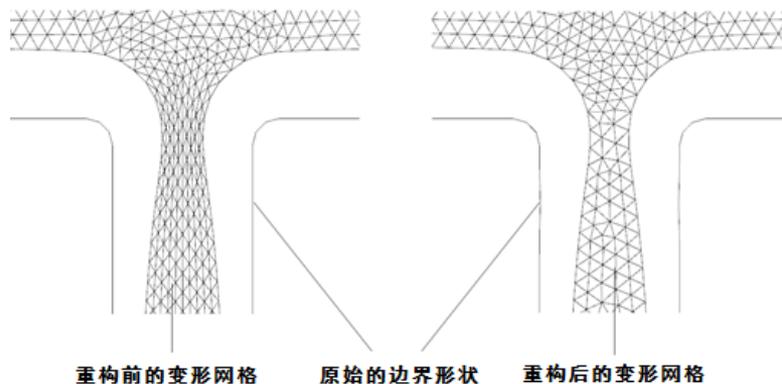
对铜电镀进行建模



通过灵敏度分析来确定细微设计变化的影响

# 自动网格重构

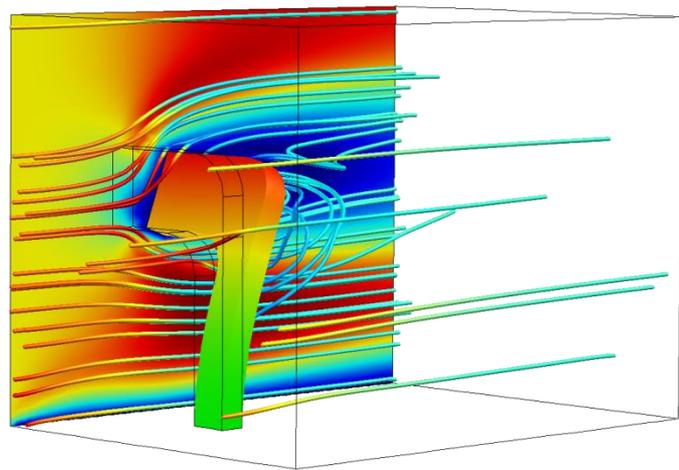
- 可在移动网格和变形几何接口中使用
- 基于用户自定义的网格质量阈值自动重构网格
- 仿真会自动在新网格上进行



在求解铜电镀问题过程中，网格自动重构前后的变化

# 移动网格

- 研究形变和固体结构
- 对流固耦合进行建模，或对在电场下的固体移动进行建模
- 核心模块具有的功能
- 附加模块中基于应用的接口进一步扩展这个功能



模型阐明了一个 MEMS 流量计的工作原理。由于流体的流动，流道内的障碍物弯曲，从而导致了流体域较大的改变。

# 材料

# 材料库

- 在核心模块中包含一个小的材料库
- 许多物理附加模块提供了额外的材料库
- 材料库产品总共包含了约 2500 种材料，其中有多种随特性温度变化的合金

材料浏览器

最近使用的材料

材料库

内建材料

- Air
- Acrylic plastic
- Alumina
- Aluminum 3003-H18
- Aluminum 6063-T83
- Aluminum
- American red oak
- Beryllium copper UNS C17200
- Brick
- Cast iron
- Concrete
- Copper
- FR4 (Circuit Board)
- Glass (quartz)
- Granite
- High-strength alloy steel
- Iron
- Magnesium AZ31B
- Mica
- Molybdenum
- Nimonic alloy 90
- Nylon
- Polysilicon
- Lead Zirconate Titanate (PZT-5H)
- Silica glass

添加到组件 添加到

已添加到模型:

移除

帮助 取消 完成

材料: Aluminum

相位:

定向/变化:

属性

属性	表达式	单位	属性组
相对磁导率	1	1	
relpermability_symmetry	3		
恒压热容	900 J/(kg*K)	J/(kg*K)	
heatcapacity_symmetry	0		
导热系数	238 W/(m*K)	W/(m*K)	
thermalconductivity_sym...	3		
电导率	3.774e7 S/m	S/m	
electricconductivity_sym...	3		

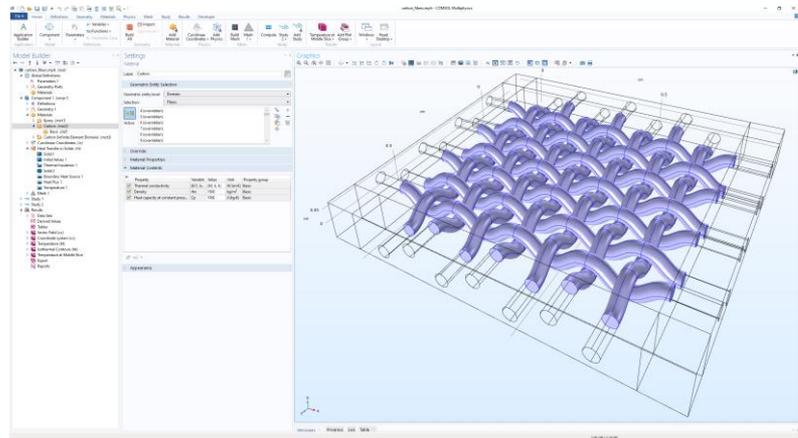
属性引用:  
从上面的列表选择属性以显示其引用。

输入

输入	变量	单位
----	----	----

# 材料定义

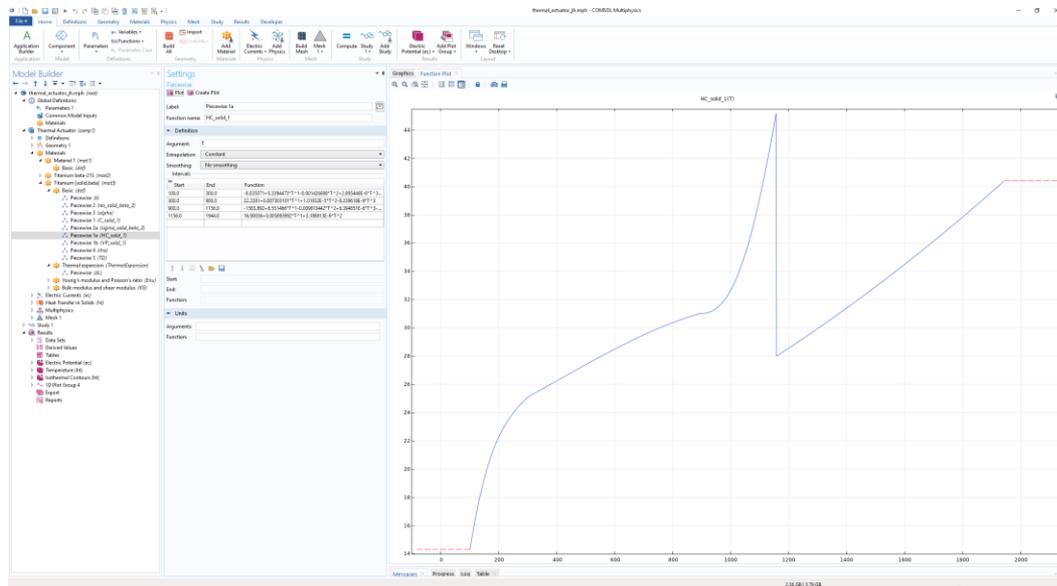
- 材料能够定义成随空间变化（非均质），各向异性，以及非连续
- 专门开发的物理场接口可以用来定义材料根据曲面形状变化的坐标系统，这在定义复合结构时很重要
- 材料可以被定义为非线性，根据物理场和他们的派生值进行定义变量



# 材料属性

## ■ 材料属性能够被定义为

- 常数
- 解析函数 (闭合形式)
- 插值表
- 分段多项式
- 外部 C 函数

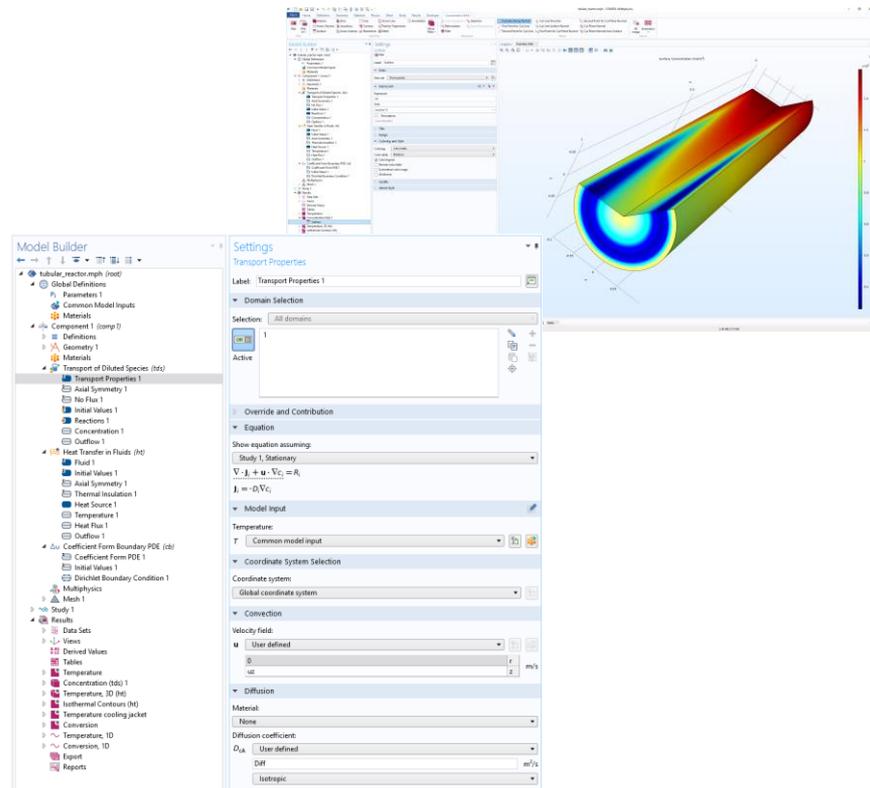


# 物理场设置

- 当安装了附加模块之后，可以在模型树中使用额外的物理场接口
  - 在特定的模块中才能使用可选的边界条件和其他建模工具
- 下表可以查阅与物理场接口及其相关建模工具对应的许可证需求
  - <https://cn.comsol.com/products/specifications>
- 以下页面中说明如果没有附加模块时，仅核心模块即可使用的功能

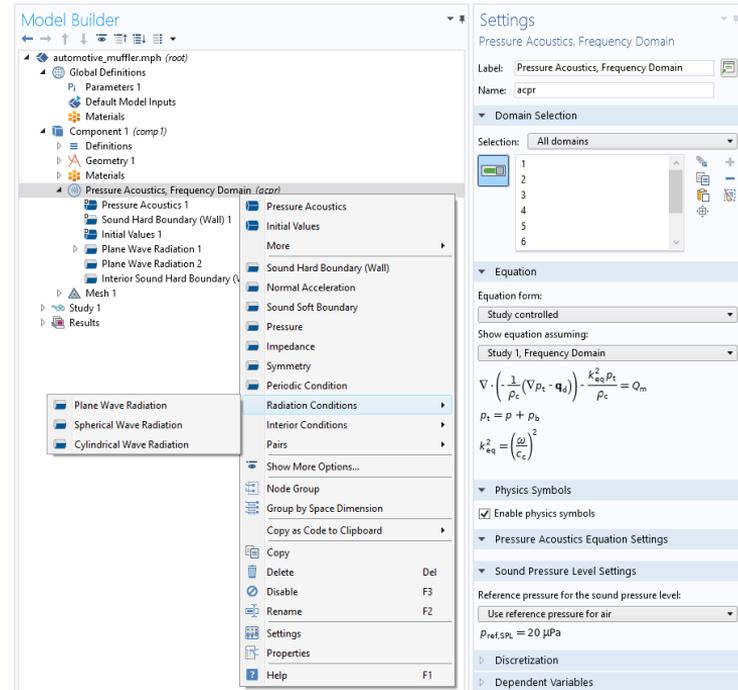
# 物理场设置

- 模型树包含一个或多个物理场接口，其中包括体积域、边界条件，以及边和点上的条件设置
- 右图显示了一个管式反应器模型，其中耦合了稀物质传递，流体传热，以及数学建模中的系数形式边界偏微分方程



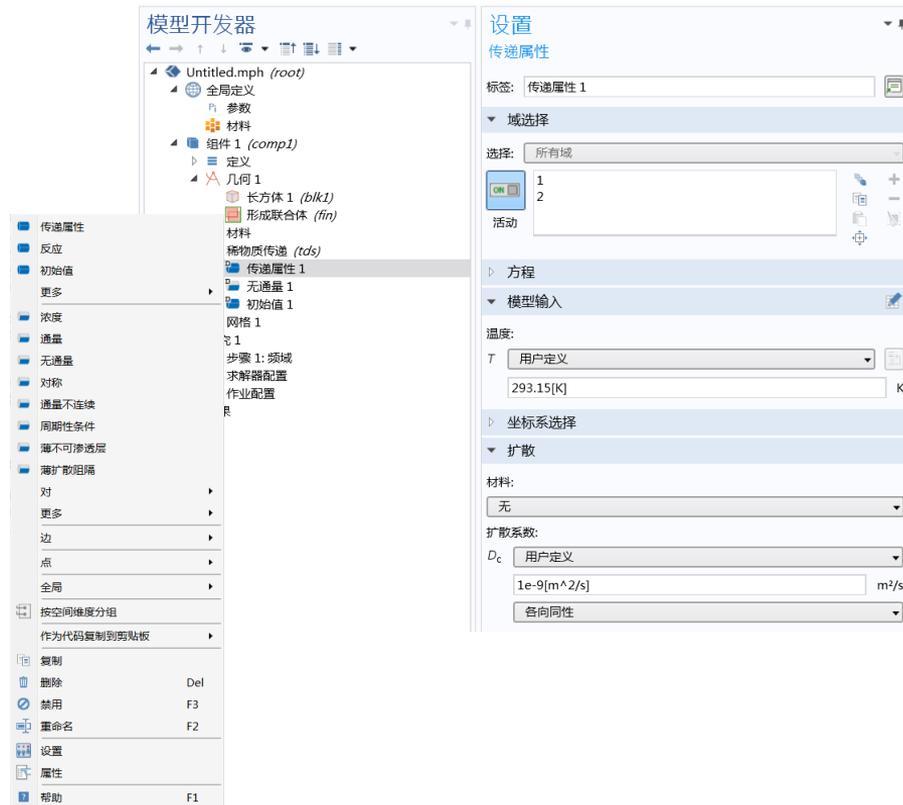
# 压力声学

- 核心模块中提供了压力声学接口，边界条件包含硬和软声场边界，压力，阻抗和辐射条件等
- 声学模块提供了更多物理场接口，选项和包含更多研究类型的高级设置



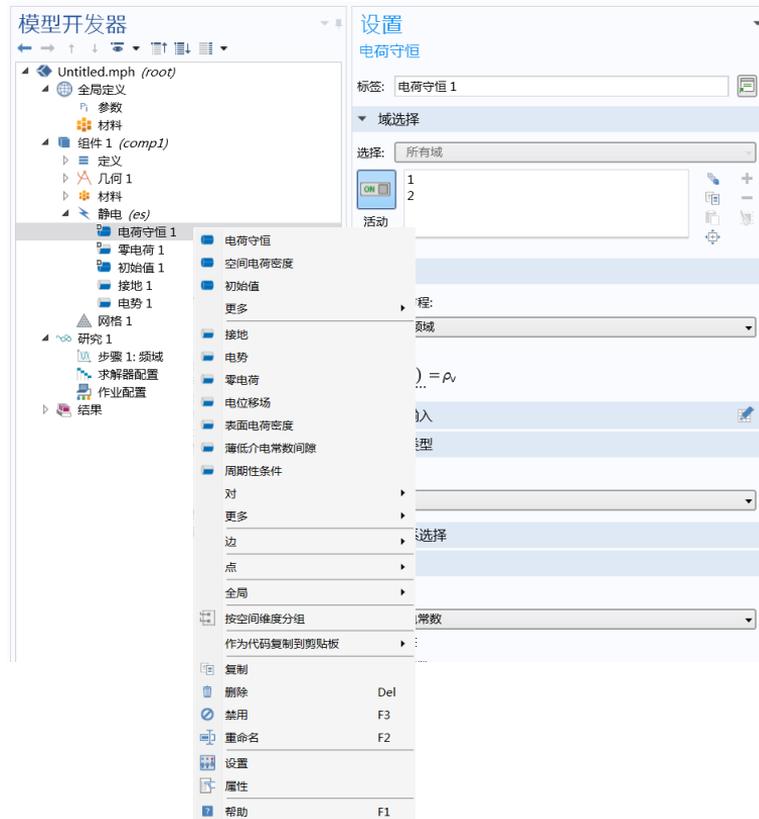
# 稀物质传递

- 核心模块提供了稀物质传递的接口，包含扩散，对流，以及反应现象的边界条件
- 一些附加模块，例如化工模块，提供了更多传质接口，选项和高级设置，以及更多的研究类型



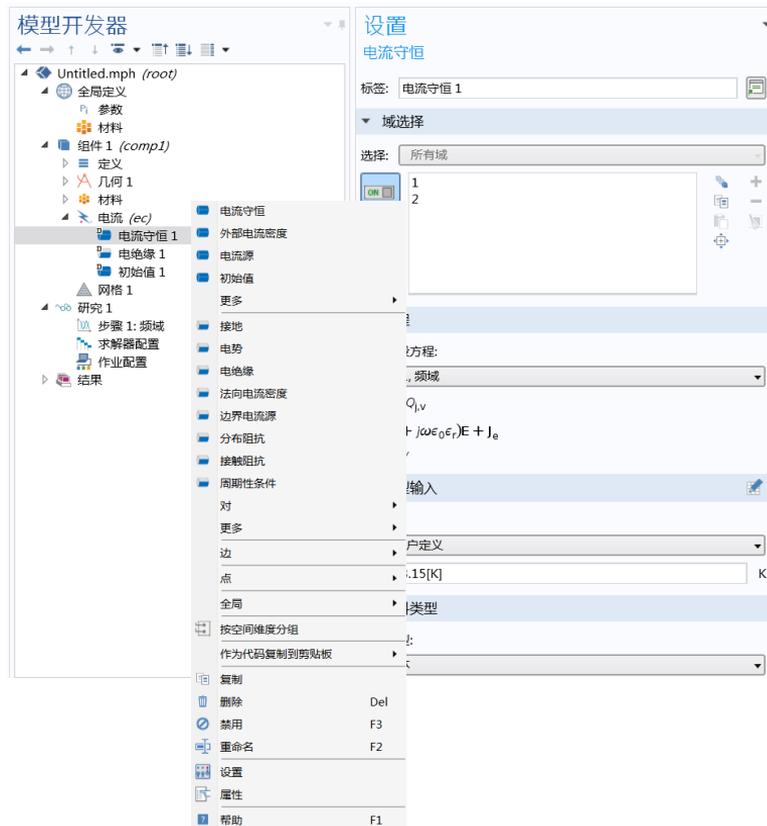
# 静电

- 核心产品提供了一个静电和电荷守恒接口，包含的边界条件如接地，电势，以及电荷密度等
- 一些电气附加模块提供了更多物理场接口，用于电磁，更高级的静电特征和更多研究类型
- AC/DC 模块提供了静电的更高级功能



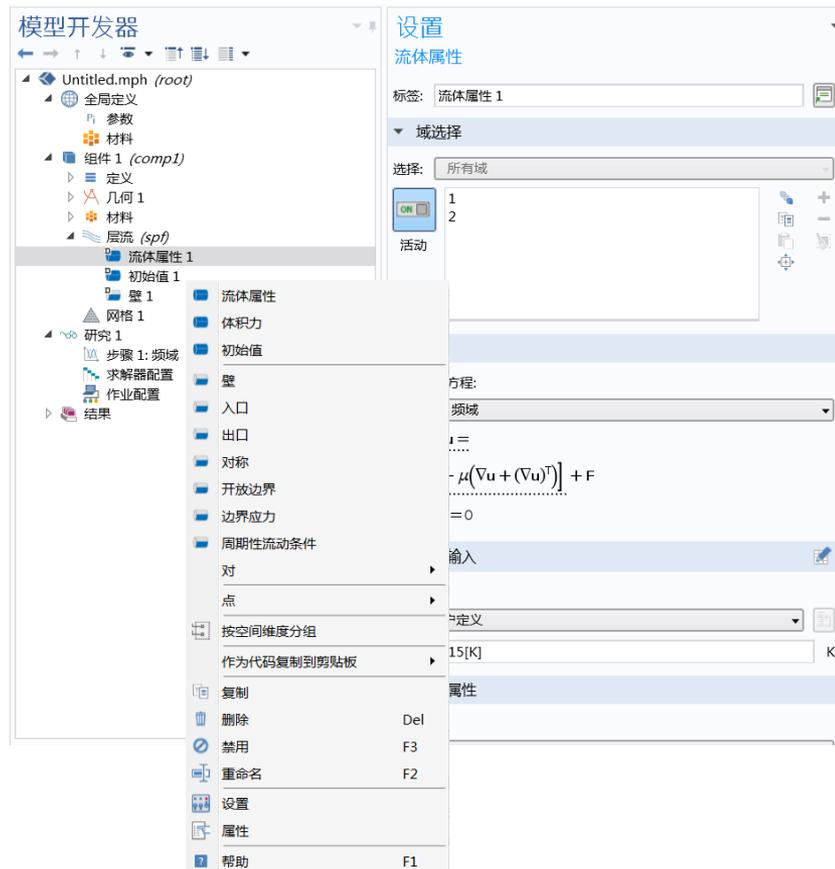
# 电流

- 核心模块提供了电流和直流电流守恒接口，以及相应的接地，电势和电流密度边界条件
- 一些电气附加模块提供了额外的物理场接口，以用于电磁，更高级的电流特征和额外的研究类型
- AC/DC 模块提供了电流仿真的更高级的功能



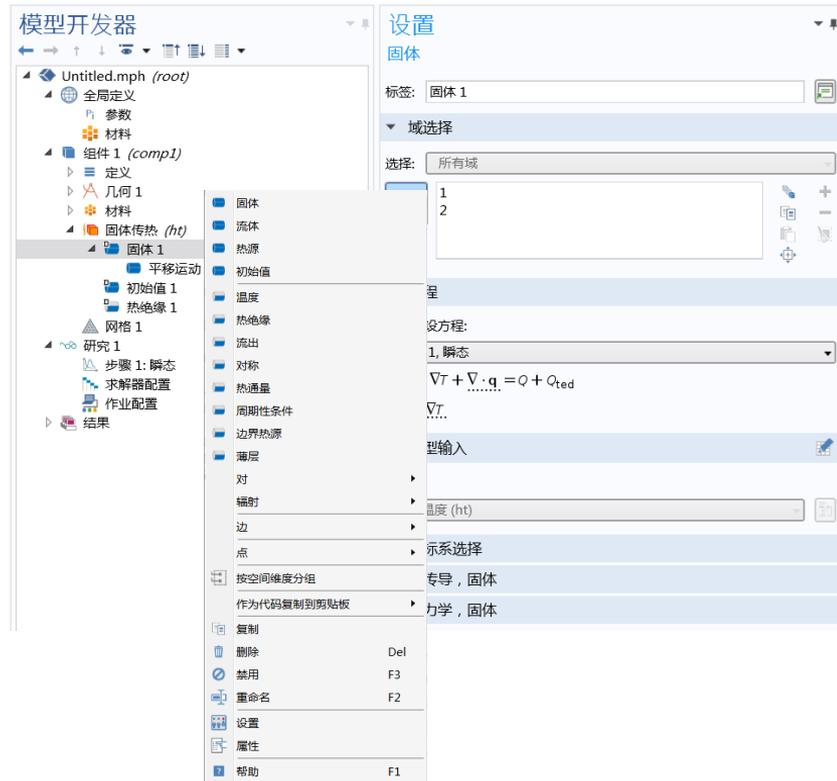
# 层流

- 核心模块提供了层流接口，以及相应的边界条件
- 一些附加模块提供了更多物理场接口用于计算流体力学，如湍流，以及更多的选项和高级设置，和更多研究类型
- CFD 模块提供了流体模拟的更加高级的功能



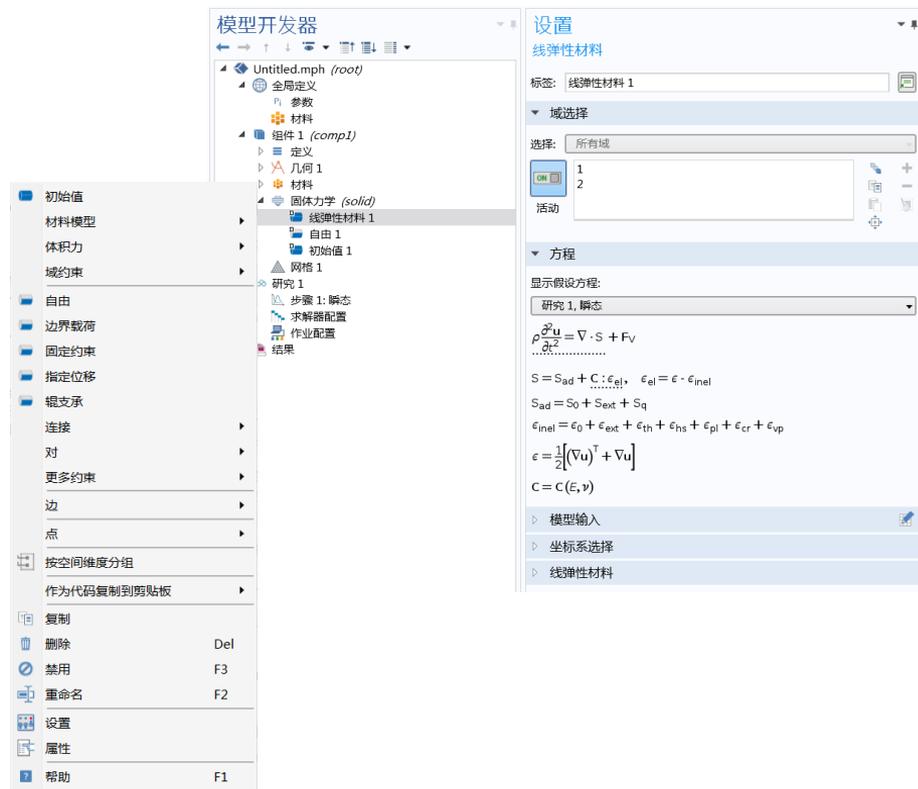
# 固体和流体传热

- 核心模块提供了固体和流体传热接口和相应的边界条件
- 一些附加模块提供了更多传热物理物理场接口，以用于更多选项和高级设置，以及更多研究类型
- 传热模块提供了传热，包含面对面辐射，以及介质中辐射的更高级传热功能



# 固体力学

- 核心模块提供了固体力学接口中的基本功能和边界条件
- 结构力学模块，MEMS 模块和声学模块为结构力学提供了更多物理场接口，主要在于有更多的选项和高级设定，以及更多研究类型
- 结构力学为结构分析提供了先进的功能，包括壳，梁，和桁架



# 微分方程

- 核心模块提供了一系列数学接口用于偏微分方程，常微分方程以及初始值问题
- 数学接口能够与任意物理场接口耦合以构建高度定制的仿真模型

The screenshot displays the COMSOL Multiphysics interface for configuring a coefficient form PDE. The **模型开发器** (Model Builder) on the left shows a hierarchical tree with the following structure:

- Untitled.mph (root)
  - 全局定义 (Global Definitions)
    - 参数 (Parameters)
    - 材料 (Materials)
  - 组件 1 (comp1)
    - 定义 (Definitions)
      - 几何 1 (Geometry 1)
      - 材料 (Materials)
    - 系数形式偏微分方程 (c) (Coefficient Form PDE)
      - 系数形式偏微分方程 1 (Coefficient Form PDE 1)
        - 零通量 1 (Zero Flux 1)
        - 初始值 1 (Initial Value 1)
        - 网格 1 (Mesh 1)
        - 研究 1 (Study 1)
          - 步骤 1: 瞬态 (Step 1: Transient)
          - 求解器配置 (Solver Configuration)
          - 作业配置 (Job Configuration)
          - 结果 (Results)

The **设置** (Settings) window for the selected PDE is shown on the right, titled **系数形式偏微分方程 1**. It includes the following configuration options:

- 域选择** (Domain Selection): 选择: 所有域 (Select: All domains)
- 方程** (Equation): 显示假设方程: 研究 1, 瞬态 (Show assumed equation: Study 1, Transient)
- 扩散系数** (Diffusion Coefficient):
  - $c$ : 1 (各向同性) (isotropic)
- 吸收系数** (Absorption Coefficient):
  - $a$ : 0  $1/m^2$
- 源项** (Source Term):
  - $f$ : 1  $1/m^2$

The **Equation Editor** displays the following mathematical equation:

$$e_0 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + a_0 \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f$$
$$\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

The **模型开发器** (Model Builder) also features a context menu with the following options:

- 系数形式偏微分方程
- 一般形式偏微分方程
- 弱形式偏微分方程
- 源
- 初始值
- 经典偏微分方程
- 更多
- 狄利克雷边界条件
- 约束
- 零通量
- 通量/源
- 周期性条件
- 更多
- 对
- 边
- 点
- 全局
- 按空间维度分组
- 作为代码复制到剪贴板
- 复制
- 删除 (Del)
- 禁用 (F3)
- 重命名 (F2)
- 设置
- 属性
- 帮助 (F1)

# 优化和灵敏度

- 核心模块提供了灵敏度分析的接口
- 对于优化功能，优化模块提供了界面和研究用于无梯度或基于梯度的算法，能够与任意的物理场耦合来开展更加广泛的优化分析

模型开发器

设置

灵敏度

计算

标签: 灵敏度

灵敏度方法

梯度方法: 伴随

研究步骤: 稳态

目标函数

表达式	描述	计算
comp1.SR	刚性比	稳态
		稳态

多个目标: 目标总和

解: 自动

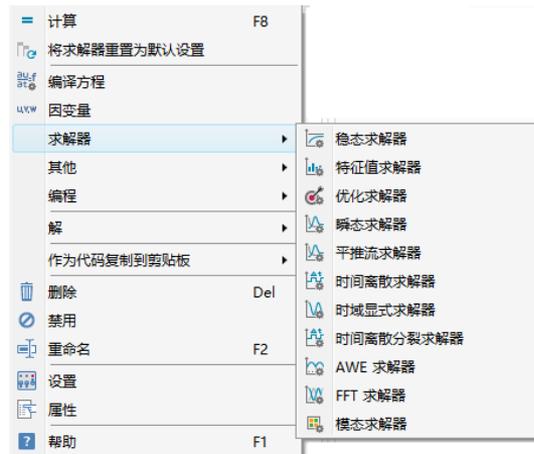
控制变量和参数

参数名称	值	缩放	值类型
dm_pl (添加的质)	0	1	实型
dm_mt (添加的质)	0	1	实型

# 研究和求解器

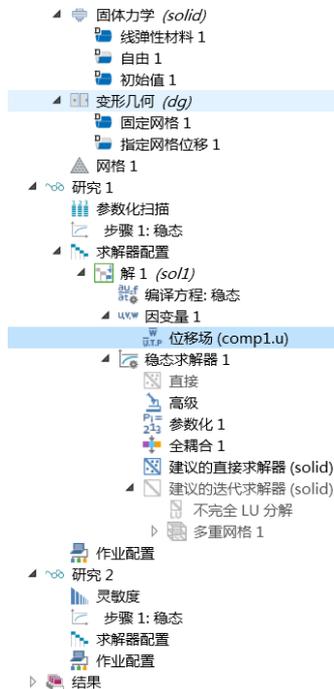
# 研究

- 一个模型可以包含一个或多个研究
- 每个研究都含有求解器配置，可以包括参数化扫描，求解器类型等
- 一个研究可以包含一个或多个研究步骤，创建组合求解器配置，例如一个稳态求解器步骤之后，再跟一个瞬态求解器步骤
- 从模型向导选择了物理场接口后，已经包含了自动的求解器建议设置
- 对于标准的仿真任务，不需要更改底层的求解器设置



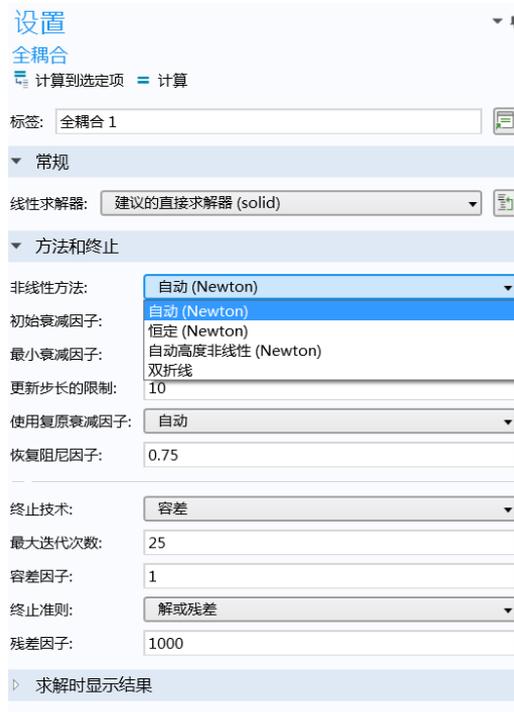
# 底层研究设置

- 研究节点能够被拓展到更底层的设置
- 包含更外层的设置，例如，一个非线性求解器和一个特征值求解器
- 可以采用全耦合或者分离式求解器
- 最底层的设定常用于控制线性系统矩阵
- 系统矩阵求解器往往被分为
  - 直接求解器
  - 迭代求解器



# 非线性求解器

- COMSOL 在必要时会自动检测系统的非线性，并使用非线性求解器
- 另外可选的是，通过使用全耦合的求解器选项，能够控制非线性求解器设定，并可在牛顿方法和双折线方法中进行选择



# 直接和迭代求解器

- 直接求解器的鲁棒性很好，但是相比迭代求解器会消耗更多的内存
- 迭代求解器需要通过调试来达到最佳效果，但是能够节约内存消耗



# 预条件器

- 迭代求解器能够通过预条件器进行加速
- 通常会在模型向导中选择物理场时自动选择预条件器
- 有多种预条件器可供选择

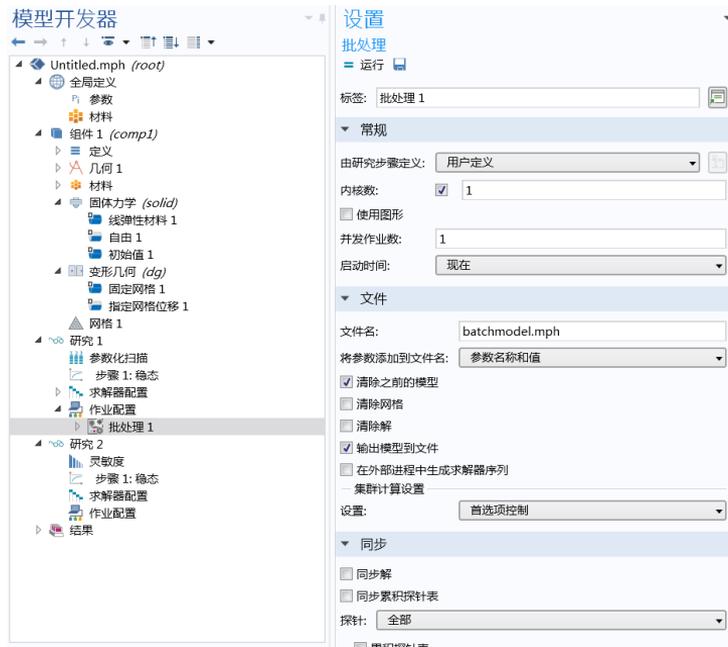


# 运行批处理任务

- 通过下列方法，COMSOL Multiphysics 能够运行批处理任务
  - COMSOL Desktop 在研究中加入一个批处理节点
  - Windows® 命令对话框中使用“comsolbatch”命令
  - Linux® 或者 macOS 命令对话框中使用“comsol batch”批处理命令

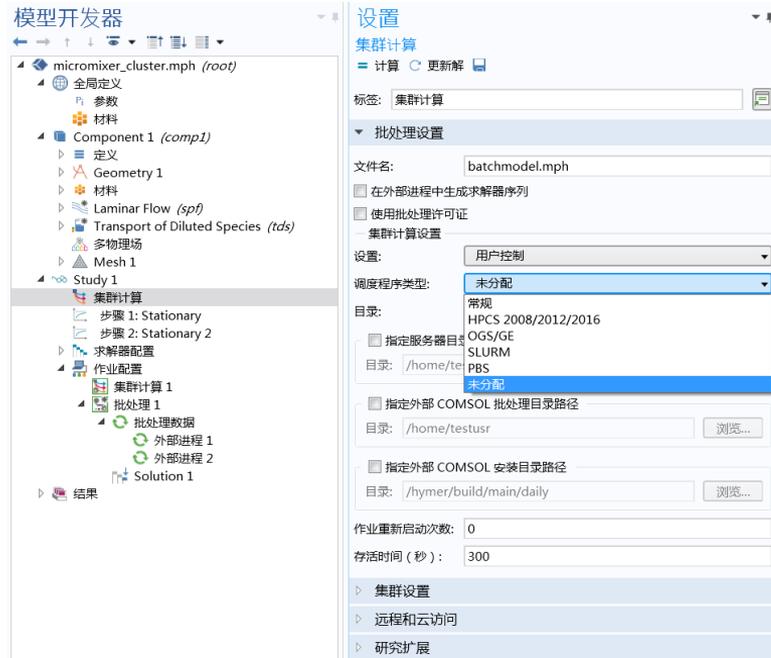
```
Command Prompt
Microsoft Windows [Version 10.0.16299.847]
(c) 2017 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\>cd C:\Users\jif
C:\Users\jif>comsolbatch -inputfile Model1.mph -outputfile Model1_solved.mph
```



# 高性能计算

- 所有的 COMSOL 许可证都允许使用多核/多处理器计算
- 只有浮动网络许可证（或 COMSOL Server 许可证）才支持集群并行计算
- COMSOL Multiphysics 支持集群扫描（完美并行）和集群计算（MPI）
- 集群和批处理工具非常相似，并且他们能够通过 COMSOL Desktop 和命令提示符窗口进行访问
- COMSOL Compiler 尚不支持并行计算



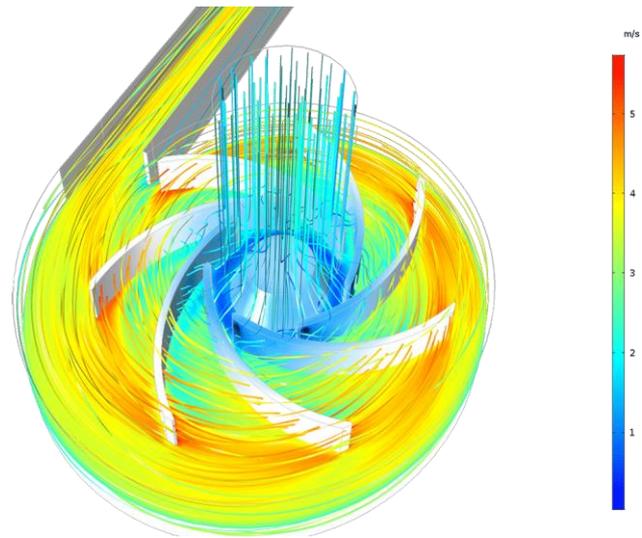
# 编程界面

- 除了批处理与集群处理命令外，COMSOL Multiphysics® 核心模块也提供了一些编程界面
  - App 开发器的方法编辑器可以使用所有可用的功能
  - 在 Java® 开发环境直接使用 COMSOL® API
  - 在COMSOL Desktop® 上通过 C 或者 Fortran（借助 C）使用外部函数调用和材料属性定义
- 通过 LiveLink™ for MATLAB®
  - 在 MATLAB® 通过 API 使用所有可用的功能

# 结果

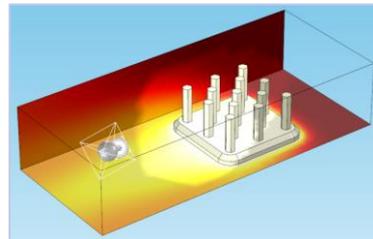
# 可视化

- 核心模块提供高级可视化工具
  - 体图
  - 面图
  - 轮廓和等值面图
  - 流线/通量线、管状以及带状图
  - 箭头图
  - 网格图
  - 动画
- 同一个可视化界面中可以结合多种绘图
- 一维，二维和三维绘图类型

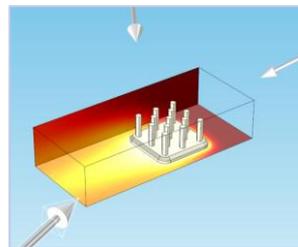


# 光照 & 场景

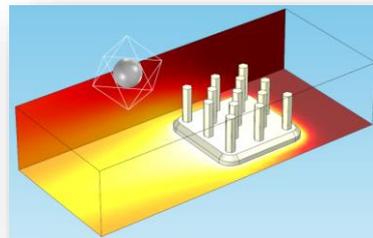
- 光的类型
  - 方向光
  - 点光源
  - 聚光灯
  - 头灯
- 更改周围光照
- 更改光照强度，镜面反射强度和颜色



聚光灯



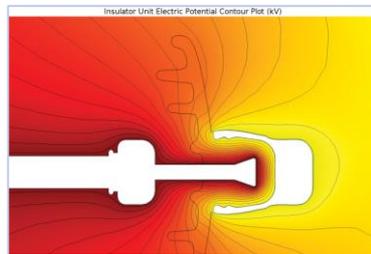
方向光



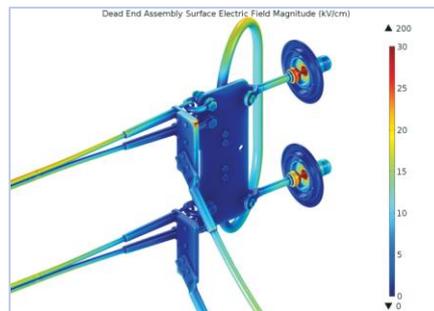
点光源

# COMSOL Multiphysics 可视化工具使用案例

- 使用优化设计模块，强化了输电线性能
- 通过减小电晕放电最小化高压输电线的噪声，能量损耗以及电磁影响
- 使用 COMSOL Multiphysics 仿真来模拟硬件周围电场和电势分布；使用结果来预测电晕放电，并优化设计最小化该效应
- IEEE Spectrum Multiphysics Simulation Insert 2014 : Jon Lemman, POWER Engineers, Inc, Idaho, USA



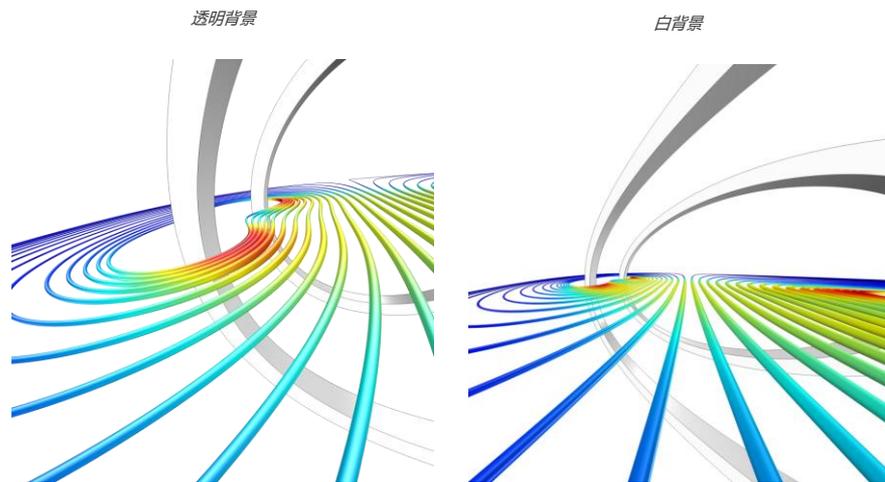
仿真结果显示了一个绝缘子引脚周围的电势



COMSOL 仿真结果显示了电场在输电线上和周围的分布

# 图片和动画导出

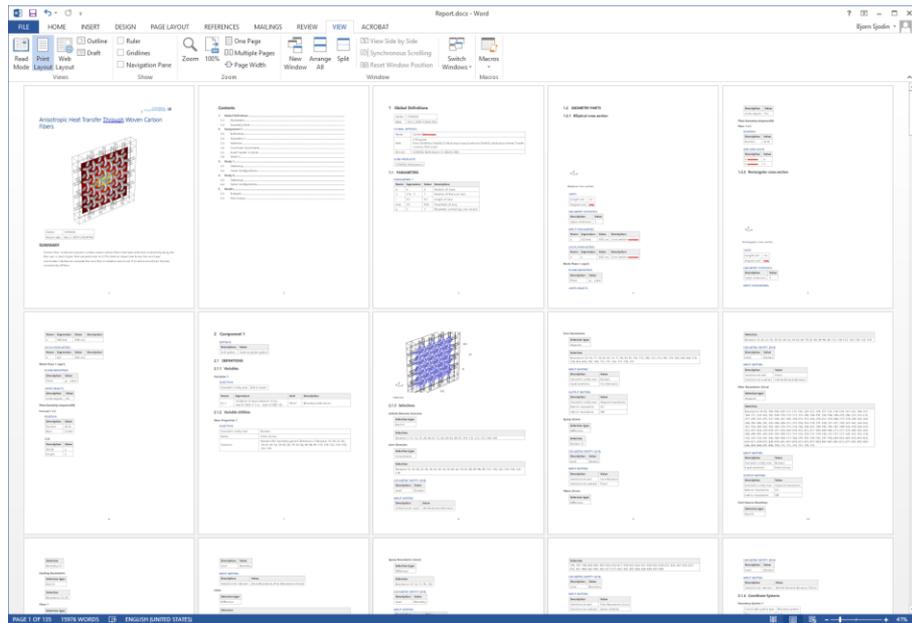
- 所有的可视化和动画都能被导出成文件
- 格式
  - JPEG
  - PNG
  - BMP
  - TIFF
  - GIF
  - EPS (只支持一维)
  - GIF 动画
  - Adobe® Flash®
  - AVI (Windows®)
  - VTK
  - glTF™
  - PLY
  - 3MF

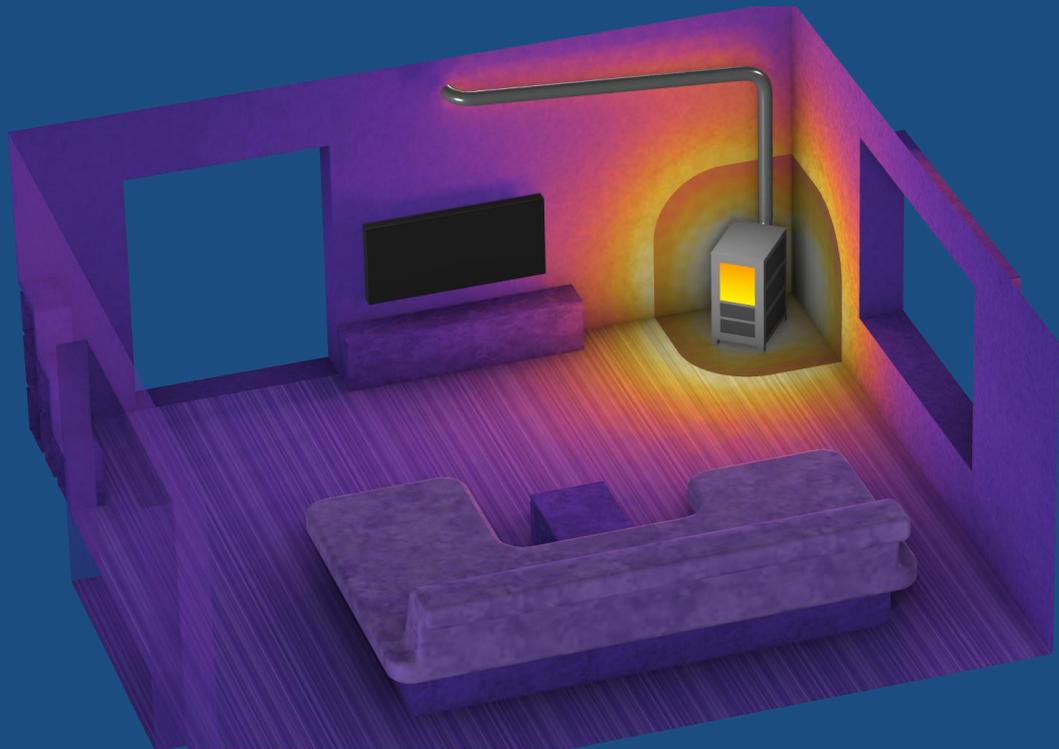


亥姆霍兹线圈仿真

# 报告

- 可以生成 Word® 和 HTML 格式的仿真报告
- 报告可以选择展现不同层面的细节
  - 简要
  - 中级
  - 完整
  - 定制
- 创建报告模板





传热模块

# COMSOL® 软件 产品库

COMSOL  
MULTIPHYSICS®

理解、预测和优化工程  
设计的仿真建模平台

## 仿真 App 部署产品

- COMSOL Compiler™
- COMSOL Server™

编译、管理和部署  
仿真 App 的工具

## 附加产品

### 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

### 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

### 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

### 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

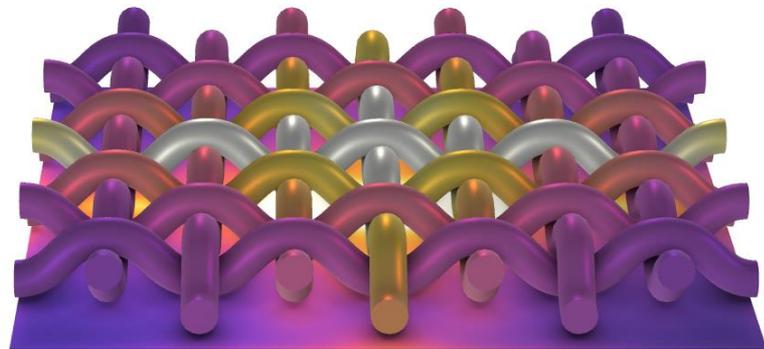
### 接口

- LiveLink™ for MATLAB®
- LiveLink™ for Simulink®
- LiveLink™ for Excel®
- CAD 导入模块
- 设计模块
- ECAD 导入模块
- LiveLink™ for SOLIDWORKS®
- LiveLink™ for Inventor®
- LiveLink™ for AutoCAD®
- LiveLink™ for Revit®
- LiveLink™ for PTC® Creo® Parametric™
- LiveLink™ for PTC® Pro/ENGINEER®
- LiveLink™ for Solid Edge®
- File Import for CATIA® V5

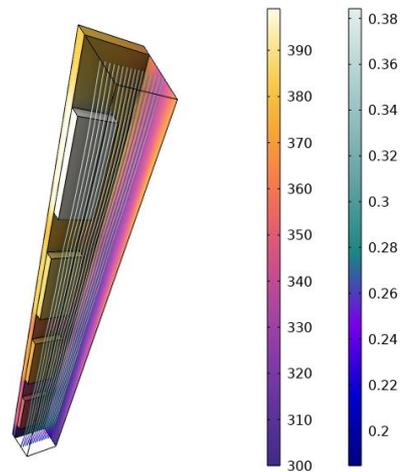
# 传热机制

# 传热机制

- 热传导
  - 傅里叶定律
  - 各向同性, 各向异性, 线性, 和非线性的导热系数
- 热对流
  - 自然对流和强制对流
  - 层流, 或湍流
- 热辐射
  - 表面对表面辐射
  - 参与介质辐射



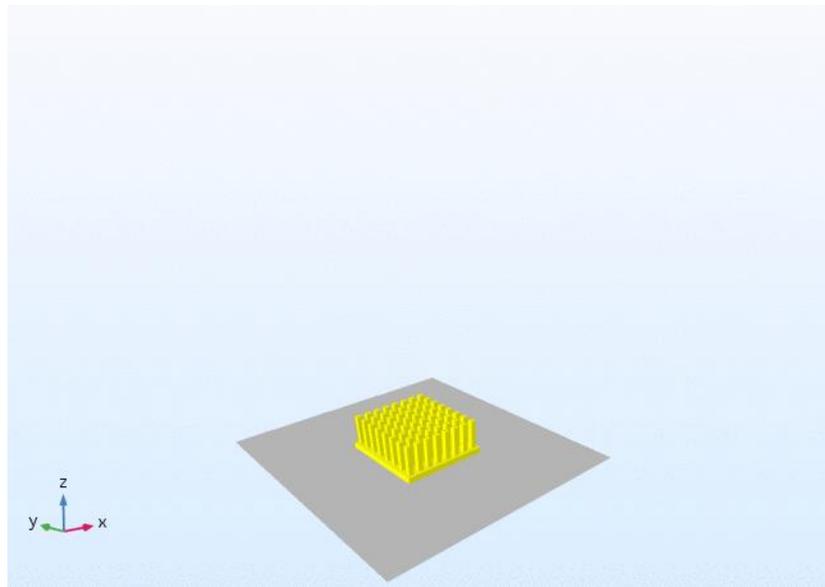
纤维结构中的热传导



空气对流传热与固体中的传导传热耦合

# 用于传热的研究

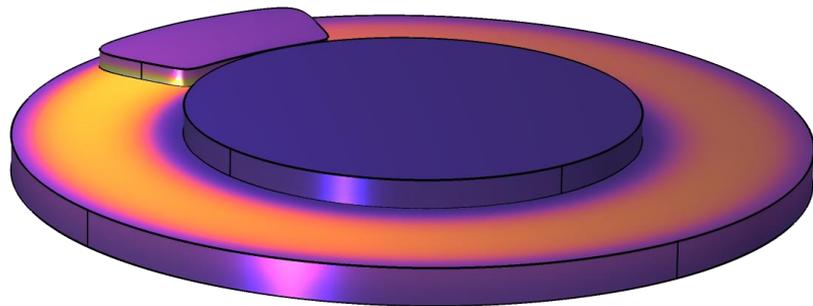
- 传热研究
  - 稳态
  - 瞬态
  - 热扰动, 频域、热扰动, 特征频率
- 多物理场研究
  - 非等温流的单向、双向耦合
  - 用于旋转机械的冻结转子
- 求解器
  - 建议的自动求解器
  - 全耦合、分离式求解器
  - 多重网格、域分解求解器
  - 伪时间步进求解器



散热器自然对流的瞬态计算

# 固体中的传热

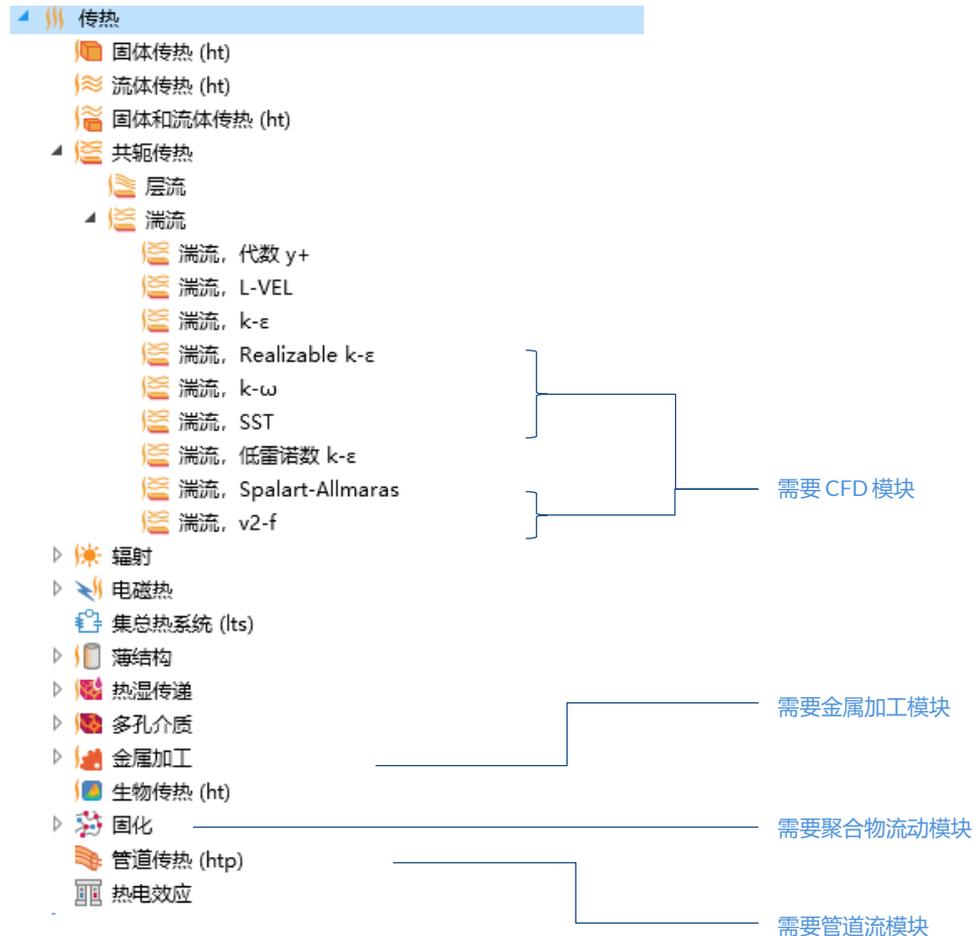
- 各向同性, 各向异性, 线性, 和非线性的导热系数
- 运动物体中的传热
- 热源
  - 用户定义, 包含空间或时间相关性
  - 来自其他物理接口
- 内置多物理场
  - 热膨胀
  - 热弹性阻尼
  - 电磁热



*汽车盘式制动器在制动过程中的温度变化*

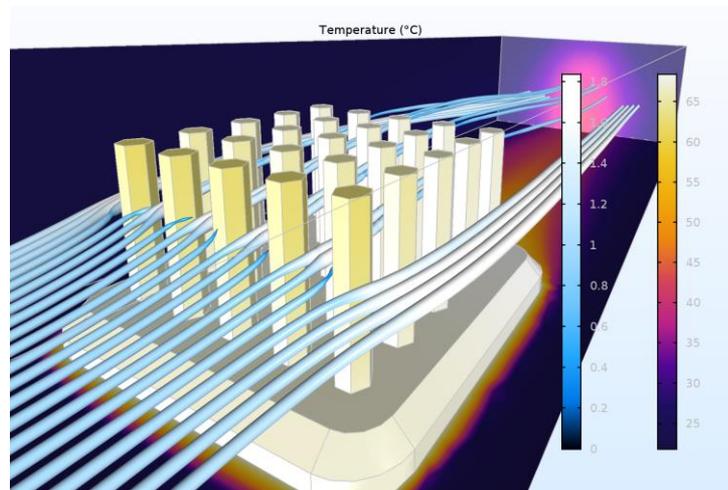
# 流体传热

- 层流和湍流
  - 粘性耗散
  - 压力做功
- 流-固界面
  - 温度连续
  - 边界层近似
- 用于流体传热的特定边界条件
  - 流入、流出、开边界
  - 滤网、风扇
  - 边界热源, ...



# 流体传热

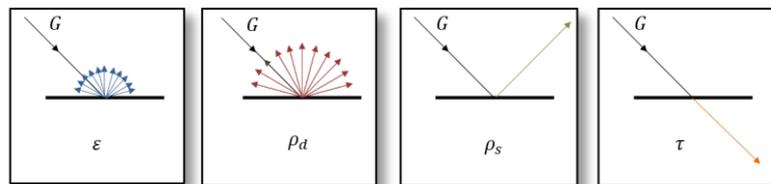
- 共轭传热
  - 重力引起的自然对流（自由对流）
  - 强制对流
- 内置库
  - 传热系数（努塞尔数校正）
  - 等效热导率
- 马兰戈尼效应，内置了表面张力系数库



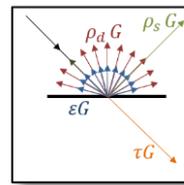
散热器中的共轭传热

# 表面对表面辐射

- 计算包含遮挡效应的视角因子
- 温度、波长和角度依赖的表面属性
- 漫反射、混合漫反射-镜面反射和半透明层
- 温度依赖性的辐射率
- 外部辐射源
  - 用户定义
  - 来自太阳 (自动计算太阳的位置信息)
- 支持平面和扇形对称



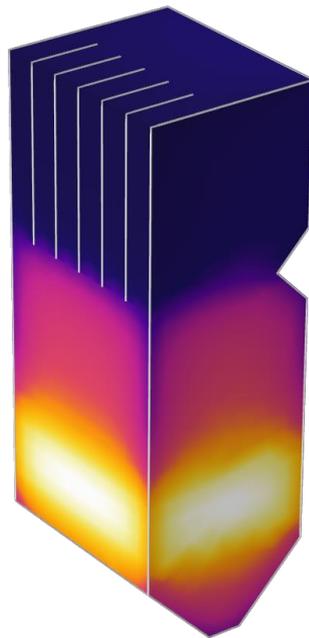
入射辐射的吸收/发射,漫反射,镜面反射以及透射



在半透明表面的辐射的吸收,发射,漫反射和透射

# 参与介质中的辐射

- 参与介质中的发射/吸收
- 辐射的散射
  - 各向同性
  - 线性各向异性
  - 非线性各向异性
  - Henyey Greenstein
- 建模方法
  - Rosseland 近似
  - P1 近似
  - 离散坐标法
- 波长依赖性

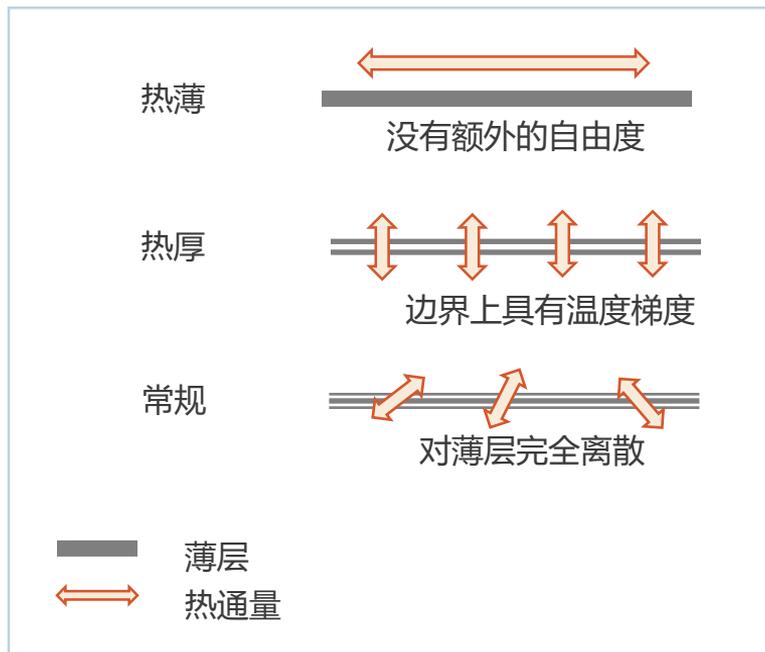


有内部挡板的锅炉内的辐射传热

# 薄结构和特定介质中的传热

# 薄结构中的传热

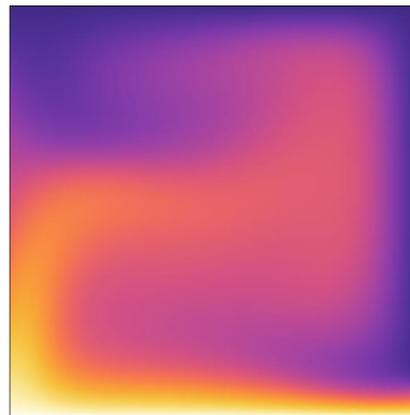
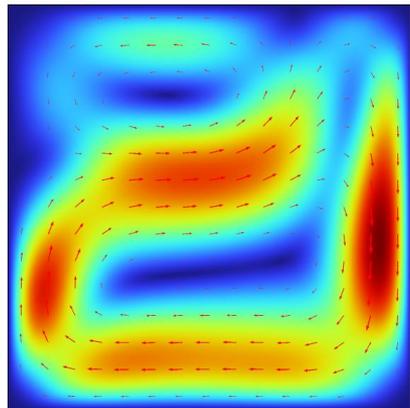
- 薄层中的传热
  - 热薄
  - 热厚
  - 常规
- 薄膜中的传热
- 裂隙中的传热
- 专用材料类型
  - 单层材料
  - 多层材料
  - 多层材料堆叠
- 专门的数据集，3D 后处理



薄层类型

# 多孔介质中的传热

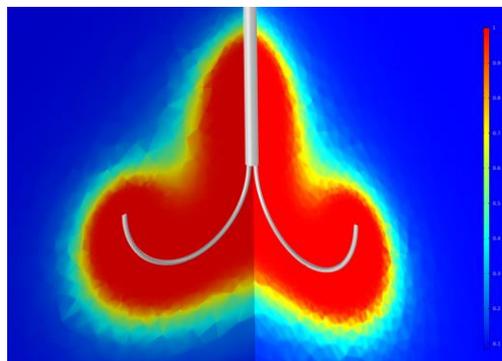
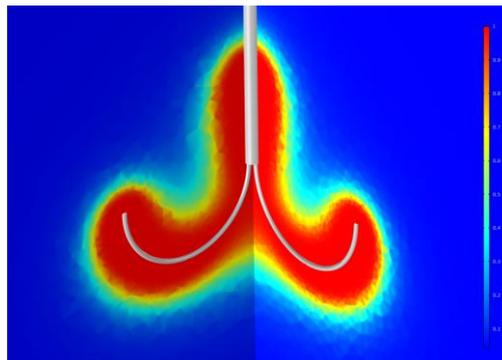
- 流体和固体基体之间的耦合
- 局部热非平衡 (LTNE)
- 地热供暖
- 静止的流体
- 由于多孔介质中曲折路径导致的热弥散
- 材料参数的体积平均



在多孔介质中由于浮力引起的  
速度场 (上) 和温度场 (下)

# 生物组织中的传热

- 活体组织中的传热
  - 组织和血液性质
  - 血液灌注率
  - 动脉血液温度
  - 新陈代谢热速率
- 生物热源
- 活体组织的热损伤
  - 温度阈值模型
  - 能量吸收模型
  - 低温损伤
- 外部热源 (RF、直流电)

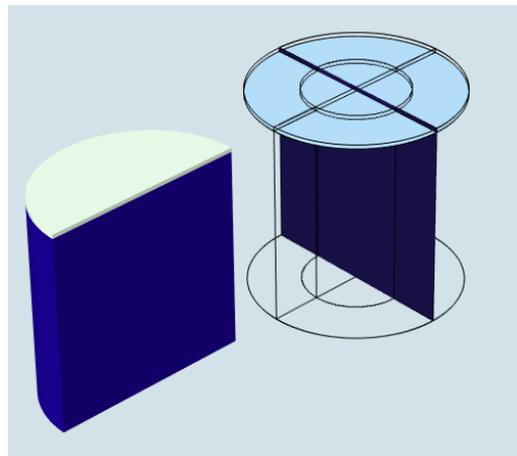


肿瘤消融过程中的坏死区域分布:  
2.5 分钟 (上) 和 5 分钟 (下)

# 相变

# 相变和相变材料

- 使用等效热容公式计算包含相变的传热
  - 相变温度
  - 潜热
  - 每种相态的材料属性
  - 相变过程中材料属性的平滑
- 耦合变形几何的相变界面特征
  - 相变温度
  - 潜热
  - 每个相一个几何域
- 固体中的不可逆转变
  - 温度阈值、Arrhenius 动力学，以及用户定义的转变模型
  - 焓变
  - 可为变化前后的状态指定不同的材料属性

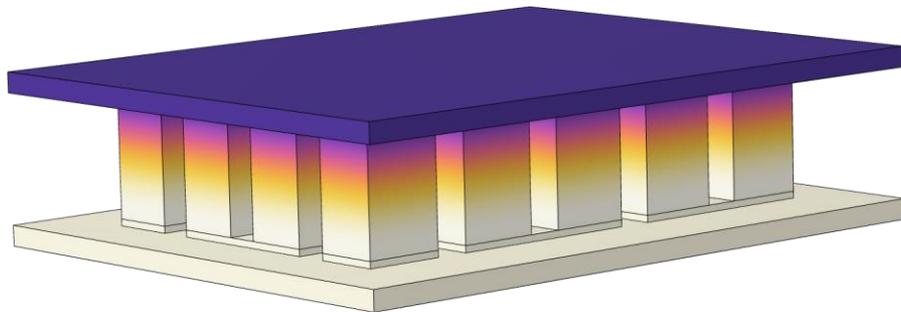


左: 相变界面位置  
右: 温度和相变界面

# 多物理场和传热

# 电磁热和热电效应

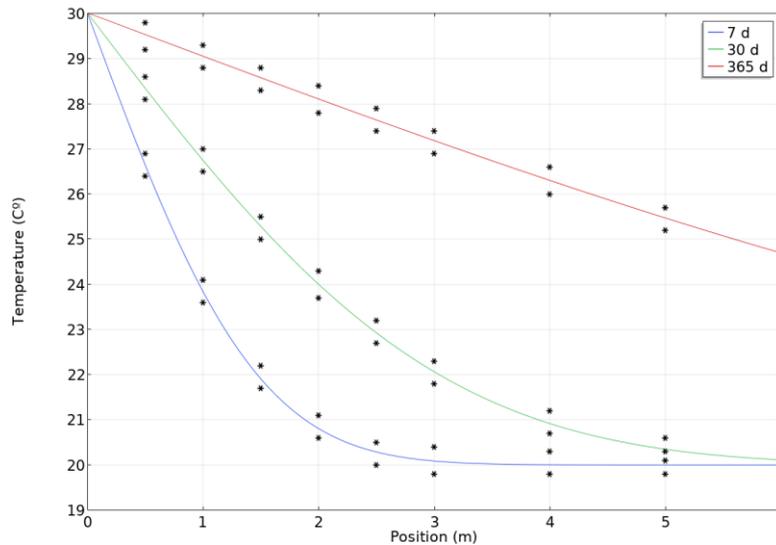
- 电磁热
  - 焦耳热
  - 感应加热 (需要 AC/DC 模块)
  - 微波加热 (需要 RF 模块)
- 热电效应
  - 珀尔贴效应
  - 塞贝克效应
  - 汤姆逊效应



*基于珀尔贴效应的单级热电冷却器的温度降*

# 热湿传递

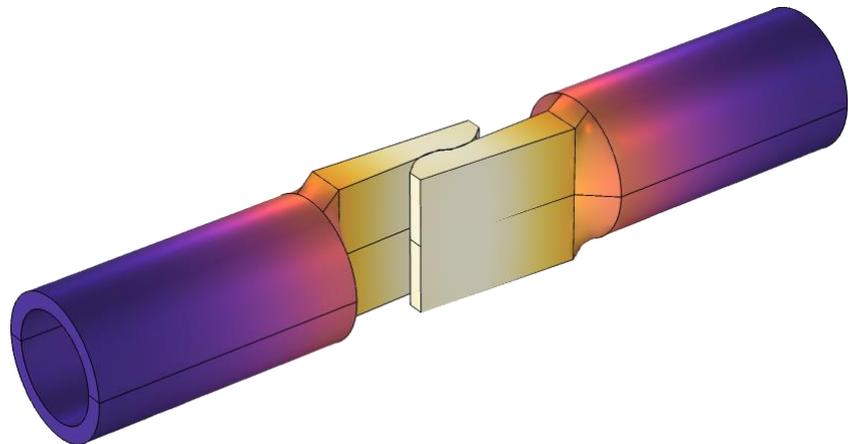
- 内置的多物理场耦合接口，用于水分输送、流动和传热
- 建筑材料模型遵循 ISO 15026
- 在空气和吸湿介质中的水分输送
- 热湿传递接口支持层流和湍流
- 润湿表面 (Wet surface) 和潮湿表面 (Moist surface) 条件用于考虑蒸发和冷凝
- 热属性依赖于含水量，包含蒸发潜热



仿真得到的温度分布 (实线) 与 ISO 15026 参考数据对比 (\*)

# 热接触

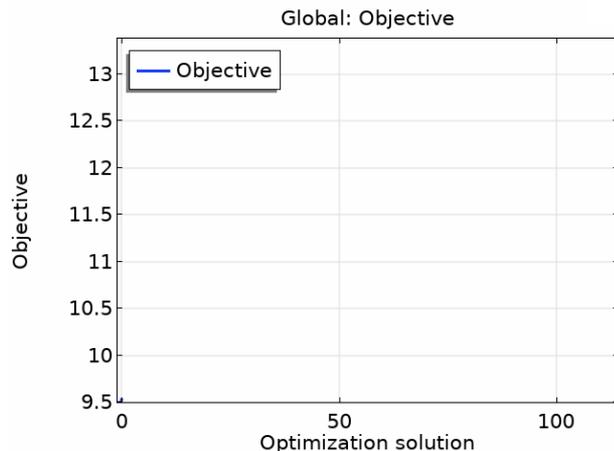
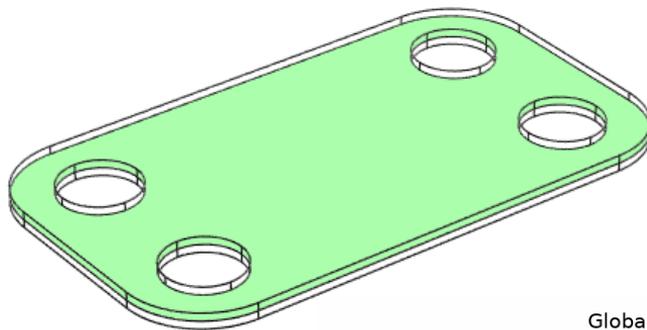
- 内置模型
  - 等效薄热阻层
  - 与压力相关的传导系数，压缩热导
  - 通过流体传导，气隙传导系数
  - 辐射传热，辐射传导系数
- 耦合结构力学接触和电接触
- 带有分配系数的摩擦热源



开关的两部分由于焦耳热引起的温度分布。  
电流和热流通过接触表面从一部分流向另一部分，热阻和表现电阻与机械接触压力耦合

# 传热相关的参数、形状和拓扑优化

- 需要用到优化模块
- 应用场景
  - 在给定运行条件和几何约束下，最大化冷却、或加热效率、或换热功率
- 依赖于 3D 打印或传统制造业
  - 参数优化
  - 拓扑优化
  - 形状优化



优化计算过程中板的变形 (左) 和换热功率 (右)。换热效率提高了50%以上。

# 材料库、天气数据和几何零件库

# 材料库

## 建筑

- Cellular concrete
- Wood (pine)
- Gypsum board
- Glass wool board
- Cellulose board
- Glass wool batt
- Cellulose batt
- Cellulose (loose)
- Lime silica brick
- Plastic coated paper
- Expanded polystyrene board (EPS)
- Extruded polystyrene board (XPS)

## 生物热

- Bone
- Fat
- Liver (human)
- Liver (porcine)
- Lung
- Muscle
- Myocardium (human)
- Myocardium (porcine)
- Prostate
- Renal cortex
- Renal medulla
- Skin
- Spleen

## 液体和气体

### 气体

- Air
- Nitrogen
- Oxygen
- Carbon dioxide
- Hydrogen
- Helium
- Steam
- Propane
- Ethanol vapor
- Diethyl ether vapor
- Freon12 vapor
- SiF4

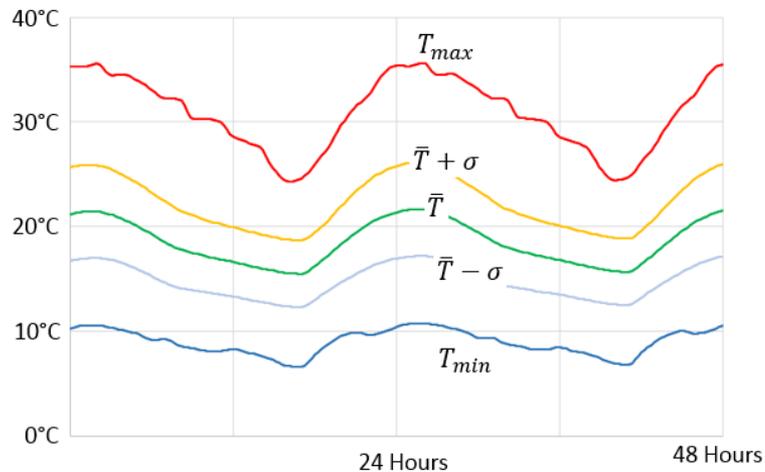
### 液体

- Engine oil
- Ethanol
- Diethyl ether
- Ethylene glycol
- Gasoline
- Glycerol
- Heptane
- Mercury
- Toluene
- Transformer oil
- Water
- R-134A (C2H2F4)
- R-22 (CHClF2)

截图来自传热模块的材料库

# 气象数据

- 世界范围内 8000+ 气象台的历史数据 (Weather Data Viewer 5.0, ASHRAE 2013 and 6.0, ASHRAE 2017)
- 与日历和时间相关的温度、露点、气压、风速，太阳的直接和散射辐射
- 在传热接口和特征中集成



两天中的温度变化

# 散热器的几何零件

- 包含不同类型散热器的几何零件
  - 可变数量的引脚或翅片和参数化的几何尺寸
- 圆角、倒角、缺口等的选择
- 实体和壳版本



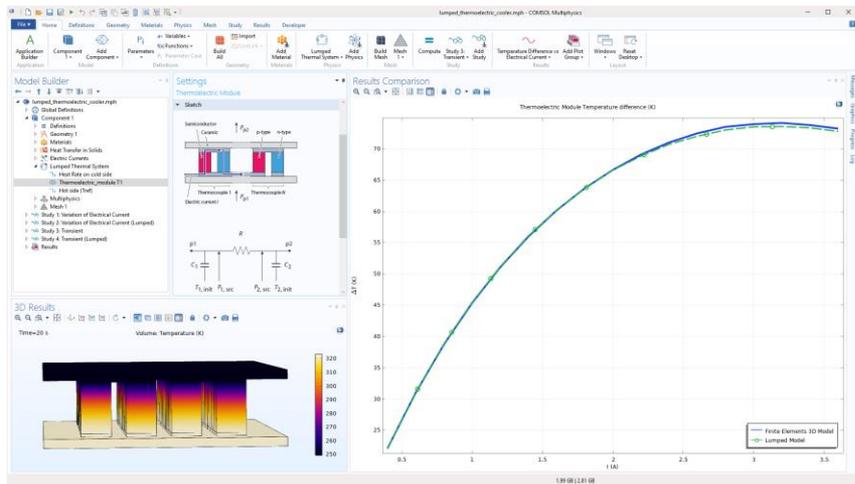
散热器零件库

**更多功能**

# 集总热系统 (LTS)

- 独立的热系统元件
- 外部终端特征将集总热系统 (LTS) 与任意维度的有限元模型耦合起来

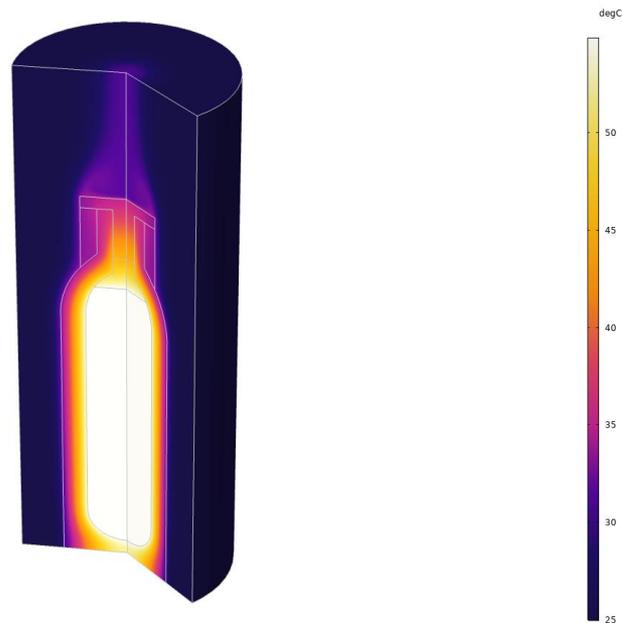
单节点器件	二节点器件
温度	传导热阻
热质量	热容
热耗率	热耗率源
外部终端	对流热阻
辐射热耗率	辐射热阻
	热电模块
	热管



TEC 的有限元模型与相应的集总热系统的计算结果比较

## 等温域

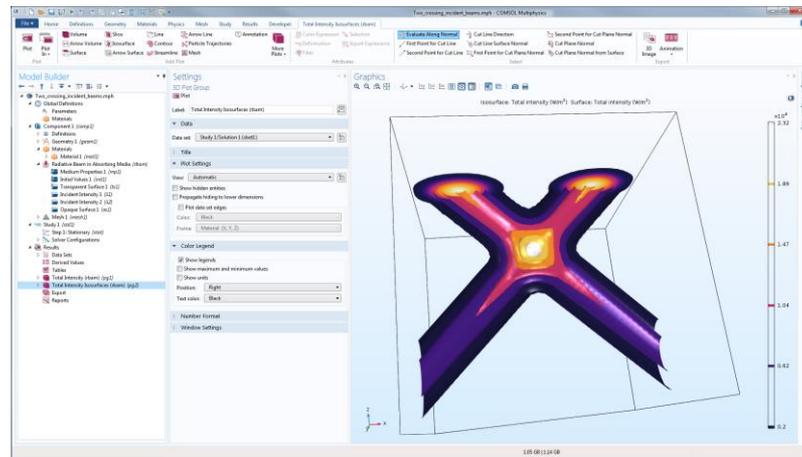
- 集总模型表示等温域
- 与其他传热特征完全兼容
- 预置的条件
  - 热绝缘
  - 通风
  - 对流热通量
  - 热接触



*保温瓶中的咖啡使用等温域来模拟温度的变化，  
其他几何区域使用常规的有限元方法模拟。*

# 非发射介质中的辐射

- 吸收-散射介质中的辐射
  - 介质不发射辐射
  - 其他方面与参与介质中的辐射相同
  - 光扩散方程
- 吸收介质中的辐射束
  - 基于 Beer-Lambert 定律
  - 吸收介质属性
  - 支持多个入射光束（不考虑干扰）
  - 每一束辐射遵循指定的方向



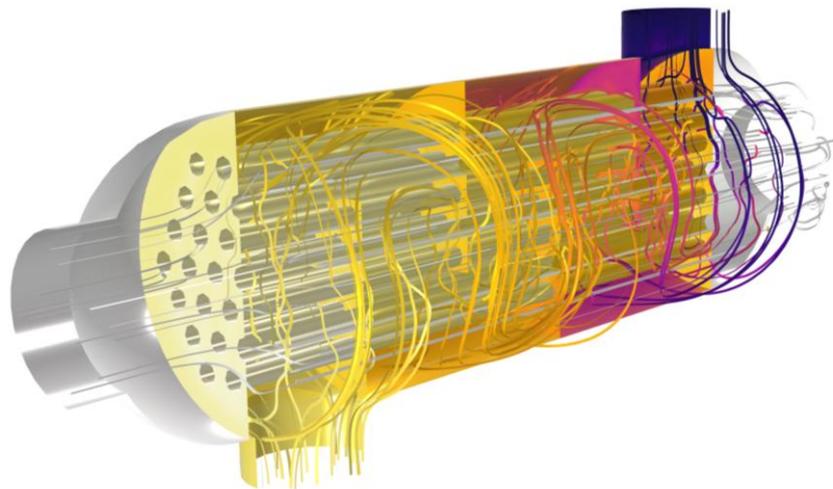
辐射束教学模型

# 案例库

本 PPT 中的示例包括来自不同模块的特征。如需获取传热模块的相关内容，请参考 <http://cn.comsol.com/heat-transfer-module>

## 管壳式换热器

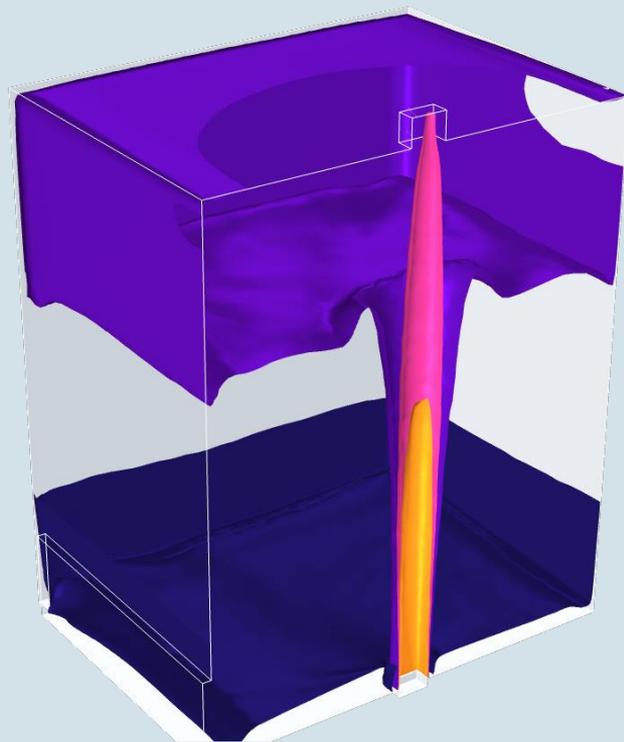
- 两种分离的不同温度的流体通过换热器实现热交换
  - 一种流体通过管道（管内）
  - 另一种流体通过管道外侧（管外）



管壳式换热器的温度剖面图和流线图

# 通风

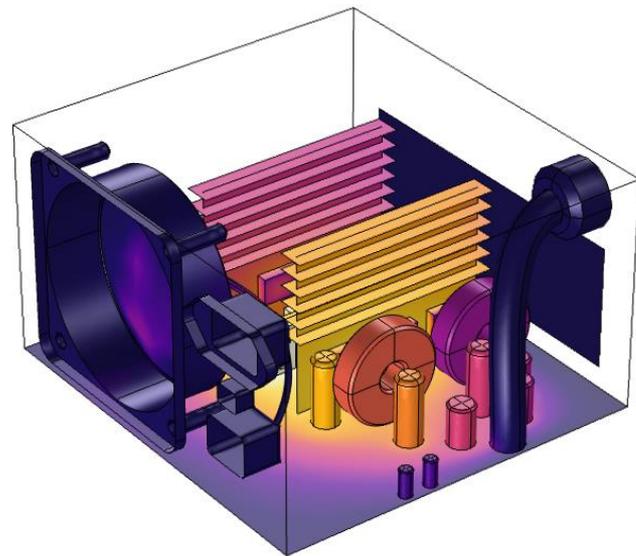
- 研究了置换通风系统的性能
- 流体的流动使用非等温湍流 $k-\omega$ 模型接口



自然对流和强制对流下的等温面图

# 电子器件冷却

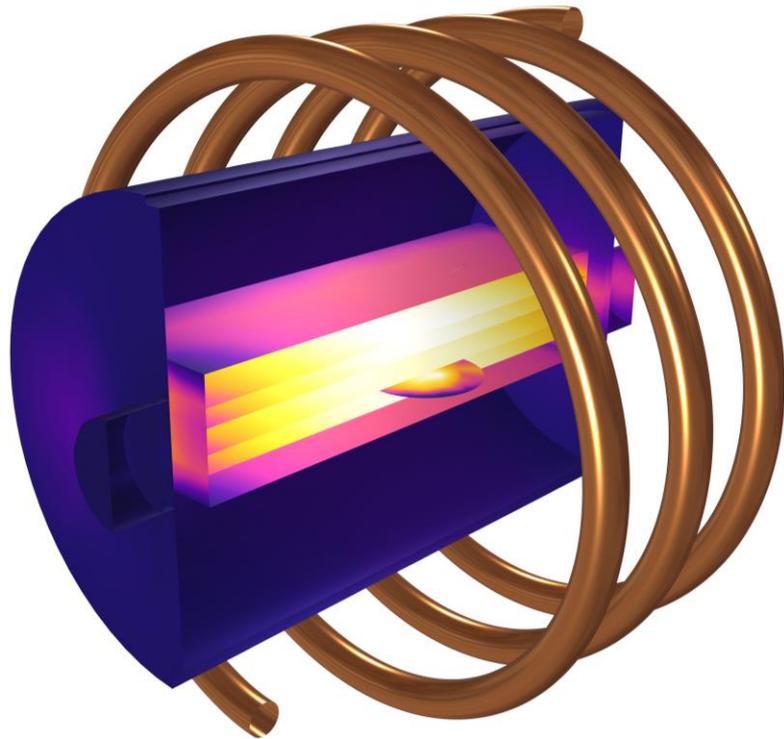
- 多种电子元件发热的供电单元 (PSU) 的空气冷却模型。
- 传热和流体流动双向全耦合
- 强制对流占主导



一个通过风扇进行强制对流冷却的供电单元 (PSU)

# 感应加热炉

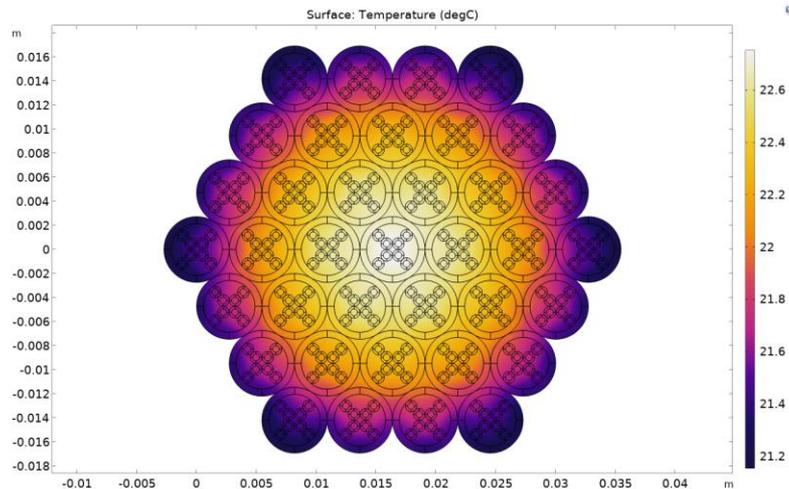
- 使用一个 8 kW、20 kHz 的射频信号对石墨基座进行加热
- 计算了晶片和外部石英管上的温度
- 在这样的高温下 ( $\sim 2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ )，辐射传热占主导
- 炉膛的设计方案对于能否得到均匀温度分布，较高的加热效率，以及控制热点至关重要



射频加热炉内的温度分布

# 导线中的损耗发热

- 以太网供电技术 (PoE 和 PoE+) 中线束的温升
- 焦耳热效应
  - 考虑了电缆束的多种构型, 以此来优化线束中的温度分布



[PoE/PoE+ 电缆加热的有限元分析](#)

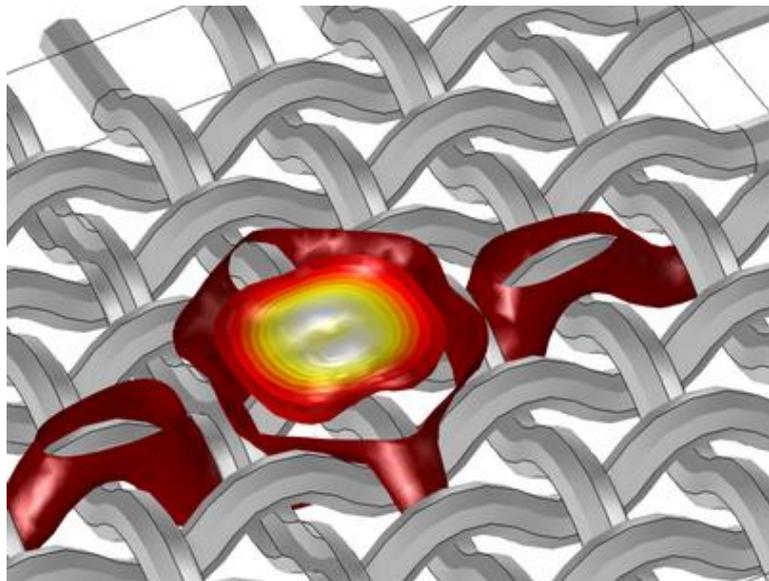
S. Francois<sup>1</sup>, and P. Namy<sup>2</sup>

1 Nexans Research Center, Lyon cedex, 2 SIMTEC, Grenoble, France

发表于2010年巴黎的COMSOL年会

# 编织碳纤维中的各向异性传热

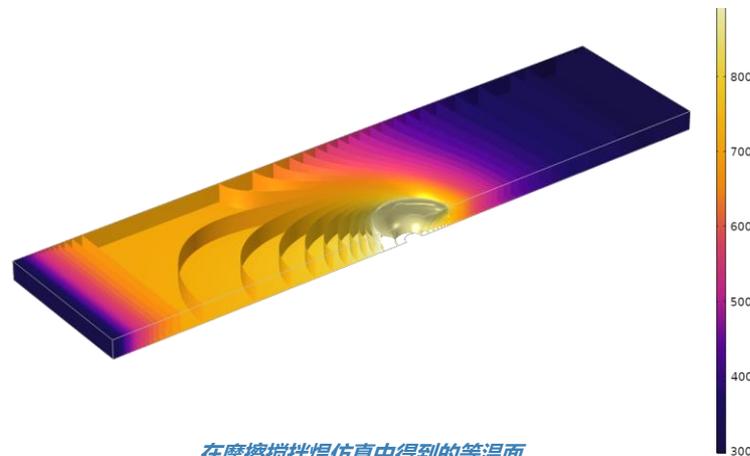
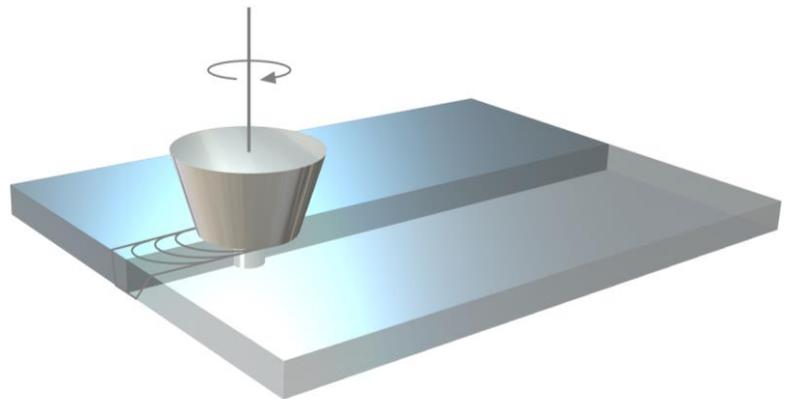
- 碳纤维增强聚合物
  - 沿着纤维方向的导热系数远高于垂直于纤维方向
- 曲线坐标系
  - 用于定义沿着纤维和垂直纤维方向的各向异性导热系数
- 无限元域
  - 避免设置的边界条件过于接近热源



纤维结构受表面热源加热的等温面分布图

# 搅拌摩擦焊

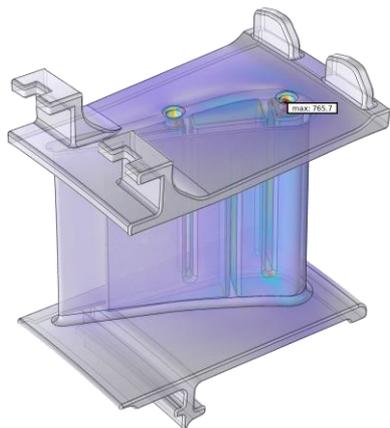
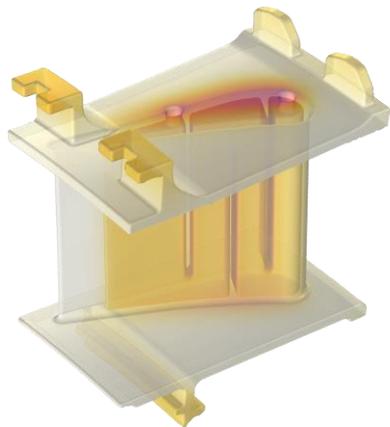
- 两块板与高速旋转的焊具之间由于摩擦发热被焊接在一起
- 热量通过传导的方式从摩擦面传导到被焊接的板
- 焊具的移动可以通过在板上添加平移相对运动来建模
- 板表面通过自然对流以及辐射进行冷却



在摩擦搅拌焊仿真中得到的等温面

# 热应力

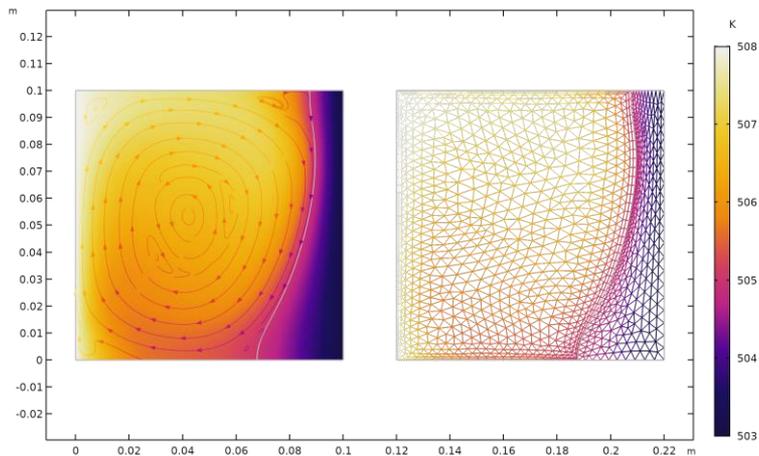
- 定子叶片中的温度梯度和热膨胀引起的结构应力和应变
- 传热与固体力学的单向耦合
- 绘图显示出了 von Mises 应力和形变



温度分布 (上)  
和 von Mises 应力 (下)

# 相变- 锡融化前沿

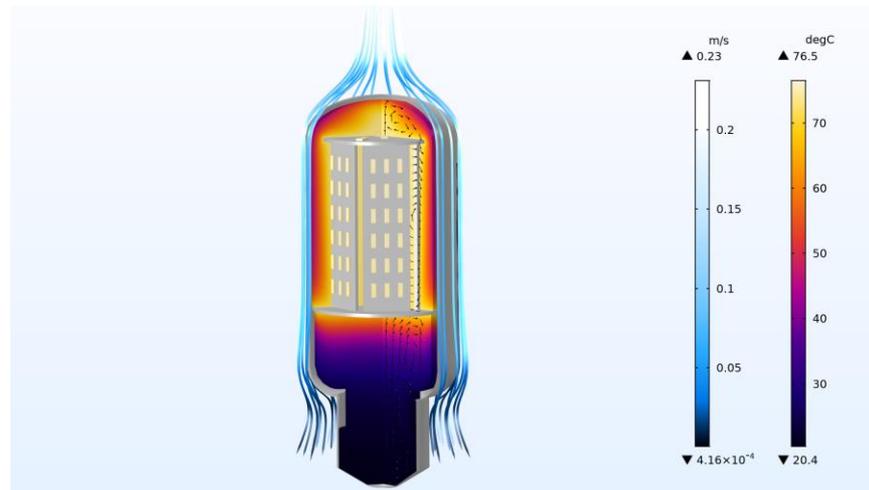
- 在同时含有固态锡和液态锡的腔内发生相变
  - 腔体的左右边界温度不同
- 流体区域和固体区域的物理过程被分开求解，但是它们共享一个移动的融化前沿边界
- 通过能量守恒计算熔融前沿边界的位置
- 熔融区域的流体会在温度梯度下发生自然对流



温度分布和流场 (左)，动网格 (右)。

# 灯泡

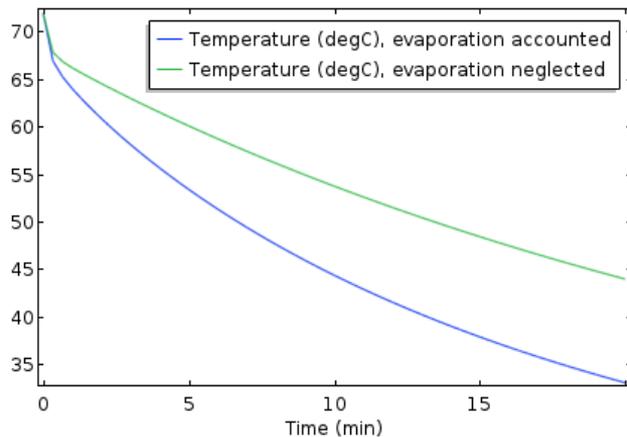
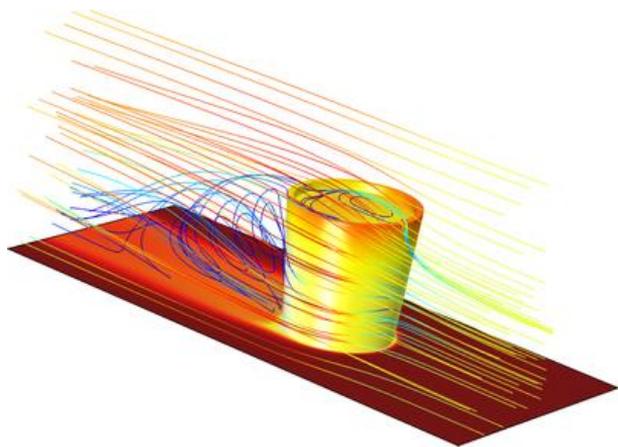
- LED 灯泡周围的自然对流
- 耦合了传热（传导，辐射和对流）和动量传递（非等温流）
- 温度变化引起的浮力驱动流体流动



灯泡的温度分布（表面图）和周围空气的速度（箭头和流线）

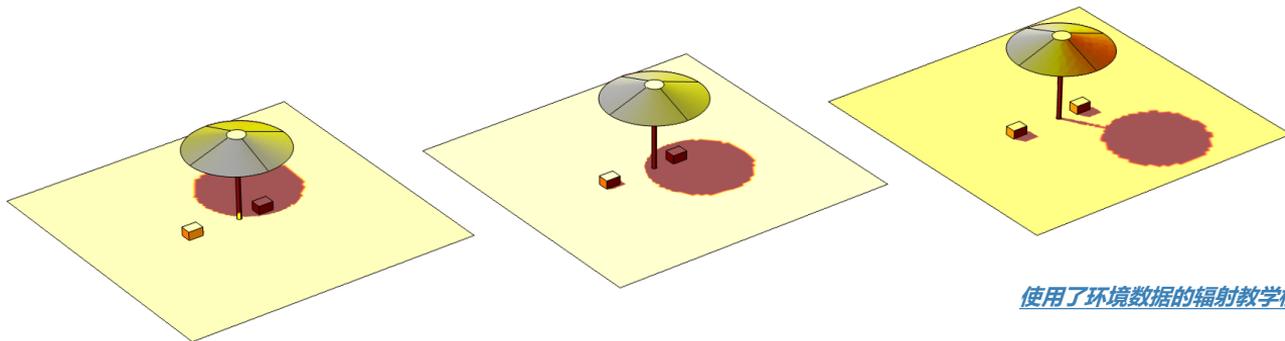
# 蒸发潜热

- 蒸发冷却
- 传热、水蒸气的传递、流体流动
- 预定义的特征
  - 蒸发热源
  - 湿空气特征可以准确地描述材料属性



# 太阳和环境辐射

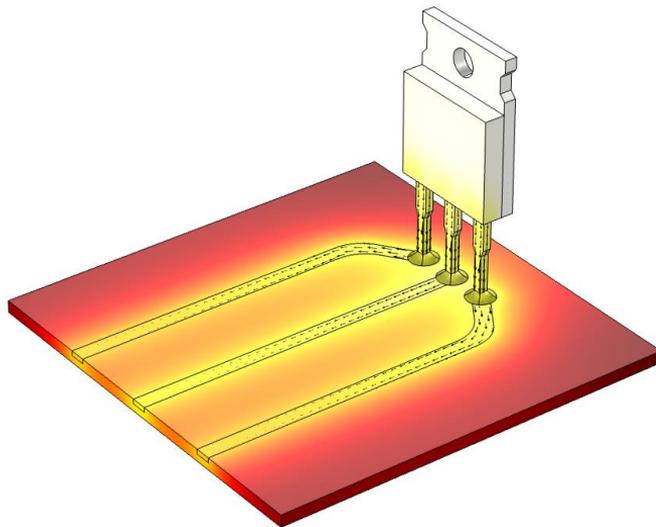
- 外部辐射热源特征，可以指定太阳位置
- 在计算中会自动考虑太阳位置变化和阴影效果
- 可以考虑表面发射率与波长的依赖性



使用了环境数据的辐射教学模型

# 功率晶体管

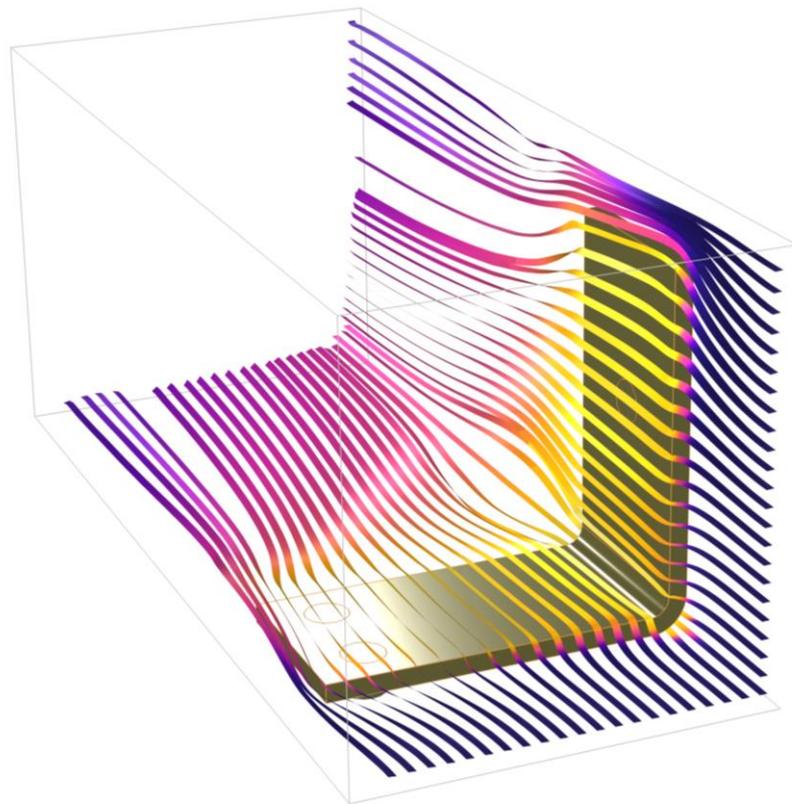
- 功率晶体管和与之连接的一部分电路板
- 仿真结果预测了晶体管的运行温度
- 确定是否需要冷却



*在大多数的电力电子器件中，都必须考虑热量的产生和传递*

## 焦耳热和流体流动

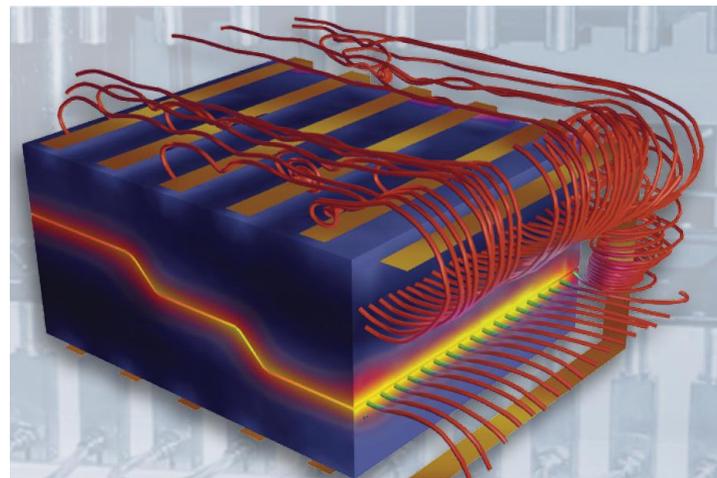
- 母线板受焦耳热，并在周围的空气流动中冷却
- 耦合了传热，电流和流体流动



母线板的温度分布和周围流场

# 感应加热

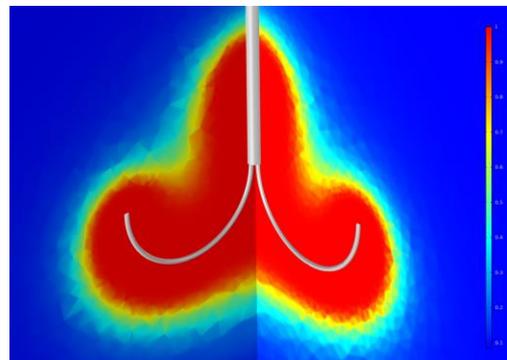
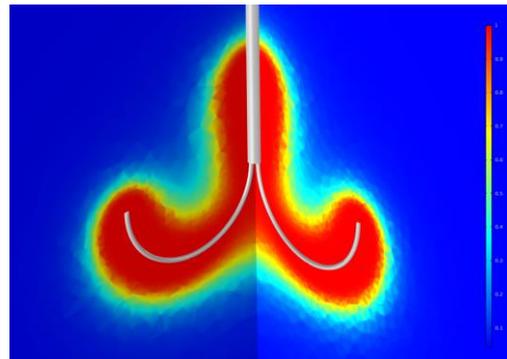
- 电磁感应加热成型装置及复合材料中的磁通量（流线）以及温度分布（彩色图）
- 耦合电磁感应与传热



*模型和圖片来自 José Feigenblum,  
RocTool, Le Bourget Du Lac, France.*

# 肿瘤消融

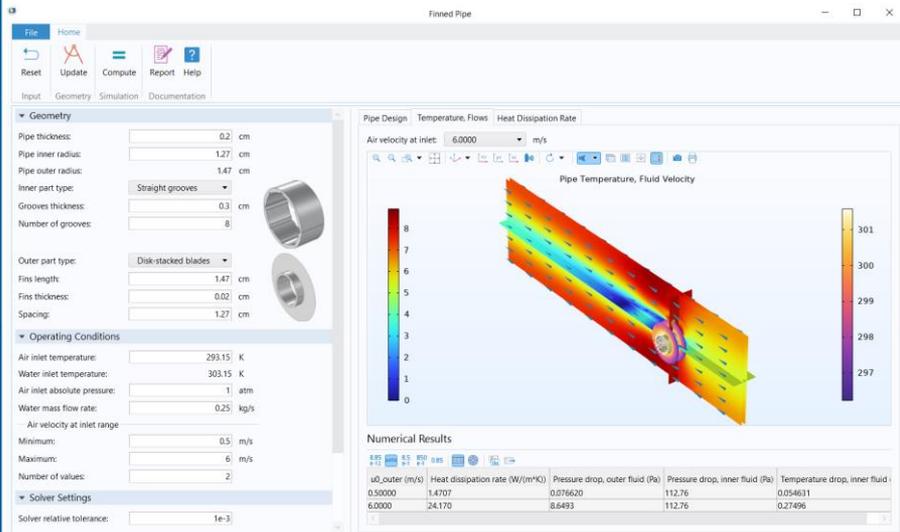
- 使用电极插入肿瘤组织中对其加热
  - 焦耳热
- 耦合生物组织传热和电流接口
  - 瞬态分析
- 使用损伤积分来预测组织的坏死情况



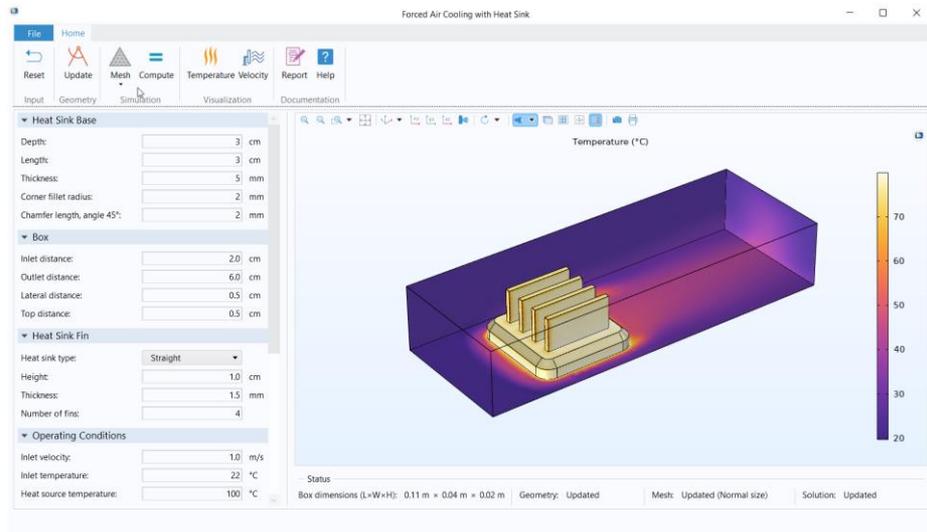
在肿瘤消融过程中的坏死区域：  
2.5分钟后 (上) 和5分钟后 (下)

# 仿真APP

# 传热相关的仿真 APP

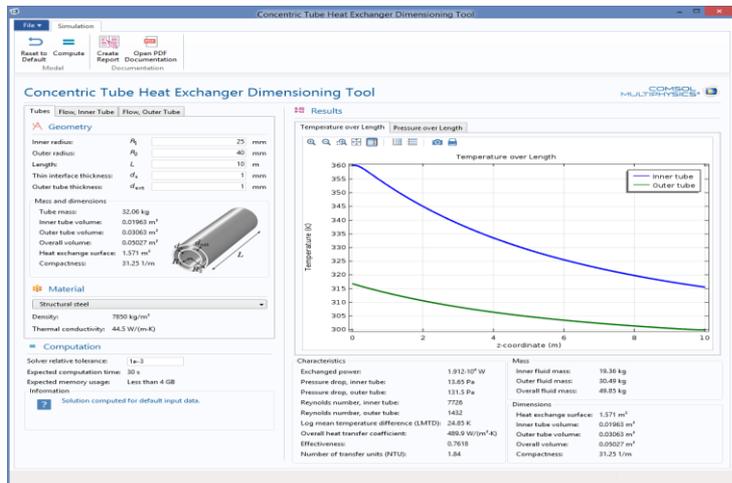


用于计算带翅片的散热管的传热性能的仿真APP界面。  
几何形状和参数可以更改。

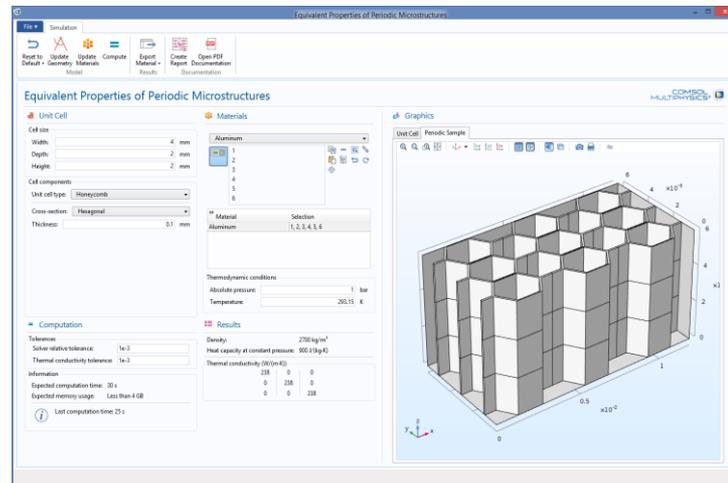


用于散热器模拟的仿真APP，模拟不同翅片大小、形状和数量的散热器。  
输出的结果显示散热器的冷却功率和冷却气体流经系统的平均压降。

# 传热相关的仿真 APP

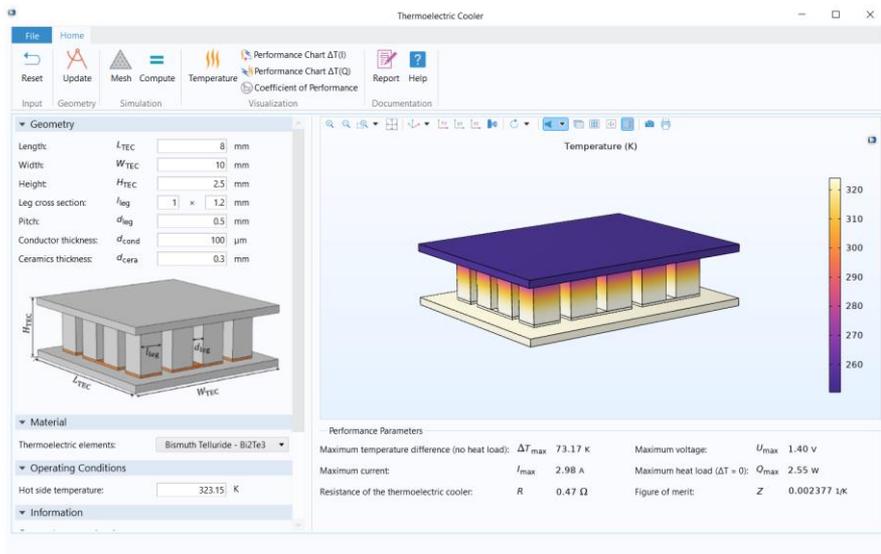


用于换热器的仿真APP。  
可以在APP界面中设置管道结构、流体属性和边界条件。

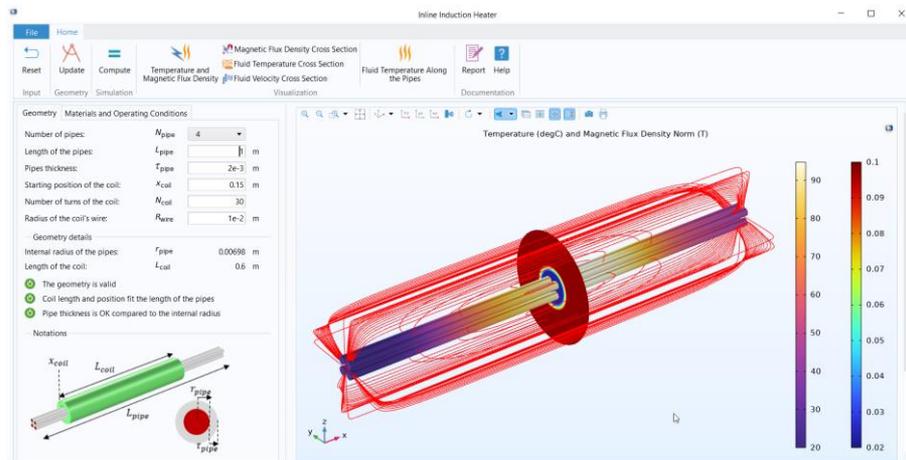


用于评估周期性结构材料热性能的仿真APP。  
内置多种单元结构可供选择。

# 传热相关的仿真 APP



用于单级热电冷却器的仿真APP。  
可以用来计算不同尺寸、几何形状、材料和运行条件下的冷却性能。



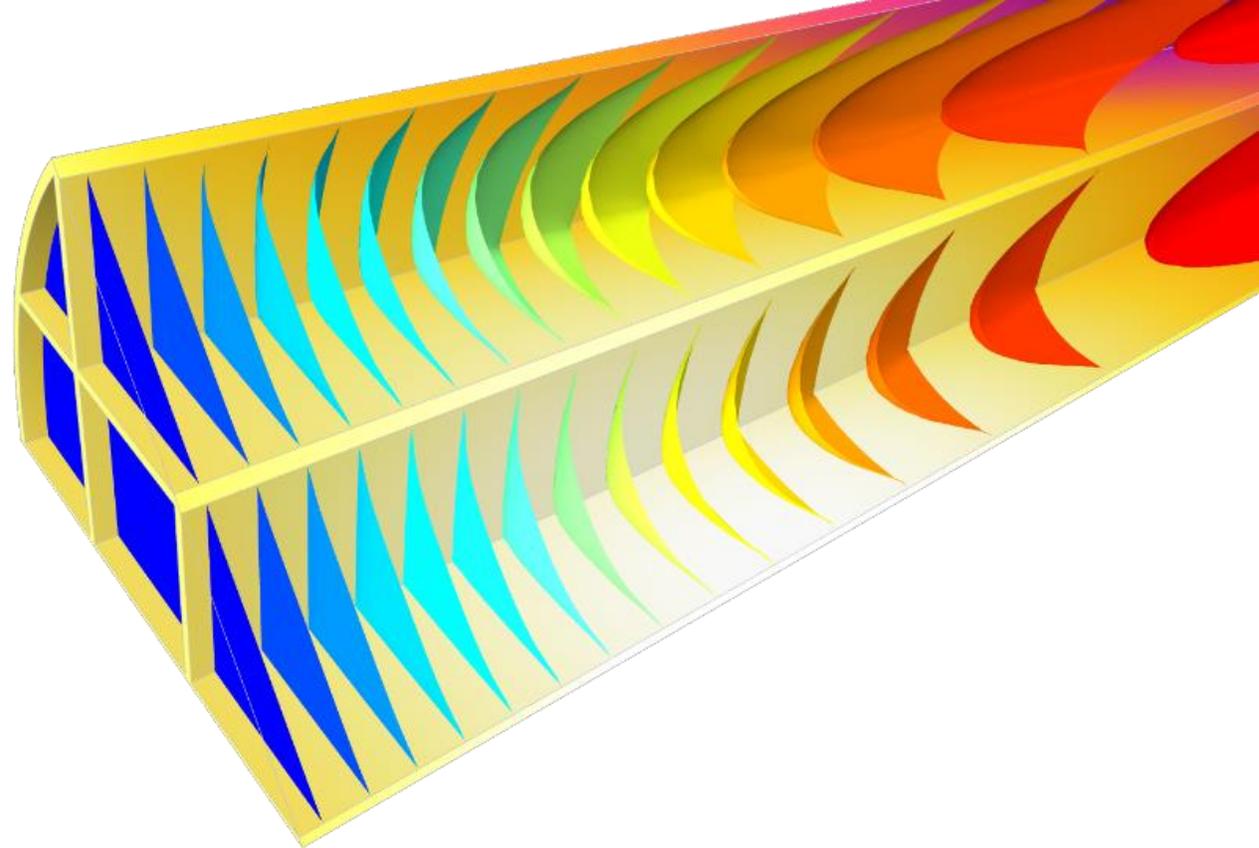
用于评估不锈钢管中的流质食物加热效率的仿真APP。  
圆形的电磁感应线圈绕在钢管的周围。

# 请联系我们

- 联系方式: [cn.comsol.com/contact](http://cn.comsol.com/contact)
  - 电话
    - 上海: 021-5077 6566
    - 北京: 010-6811 8080
  - 技术支持邮箱: [support@comsol.com](mailto:support@comsol.com)
- 官方微信公众号
  - COMSOL-China



请扫描二维码  
关注 COMSOL  
微信公众号



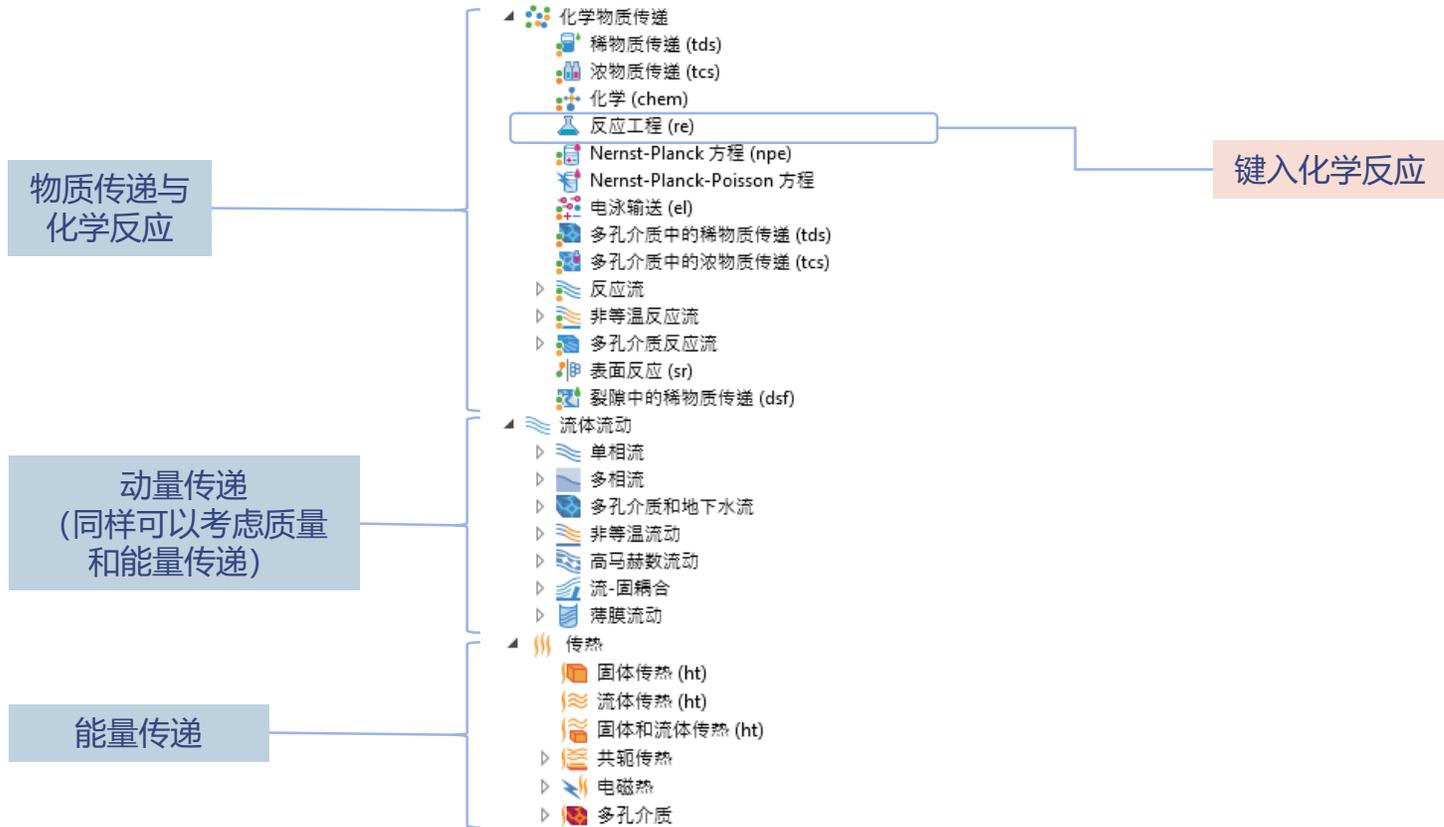
# 化学反应工程模块

COMSOL 中国

# 质量、动量、能量、化学反应



# 化学反应工程模块与CFD模块接口



## 化学反应工程模块与 CFD 模块

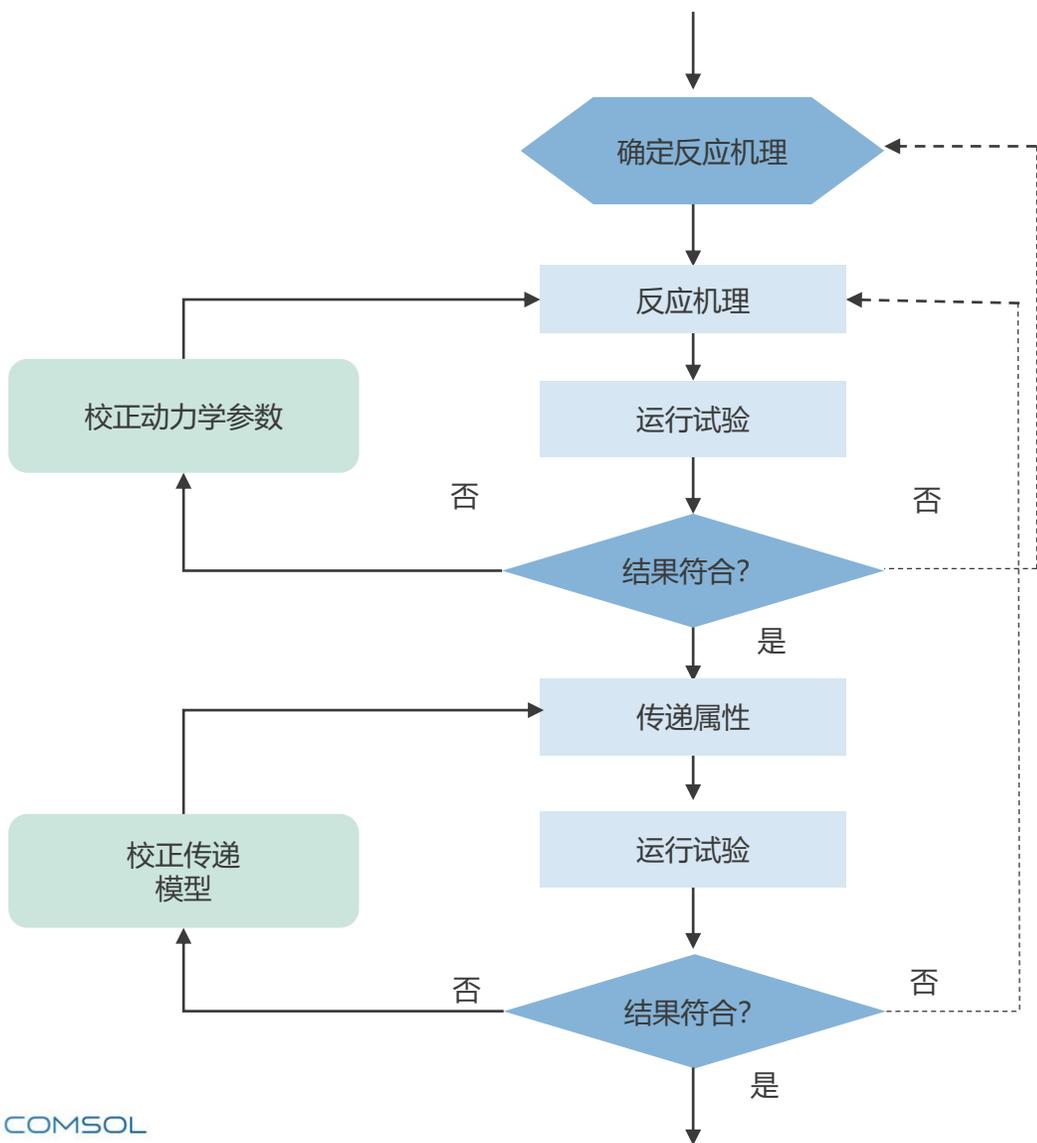
# 化学反应工程模块

- 化学组分传递与反应
  - 浓溶液（Maxwell-Stefan扩散）、含尘气体、稀溶液
  - 自由与多孔介质
- 反应动力学
  - 质量作用定律
  - 浓度解析表达式输入
  - 均相和非均相反应
  - CHEMKIN® 导入
- 流体流动
  - 层流与多孔介质流动
- 传热模块
  - 固体、流体传热与辐射（对环境辐射）

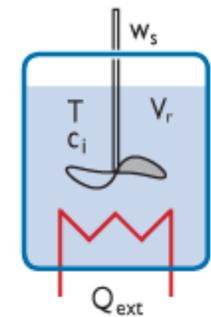


化学反应工程模块质量传递与化学反应接口

# 建模策略

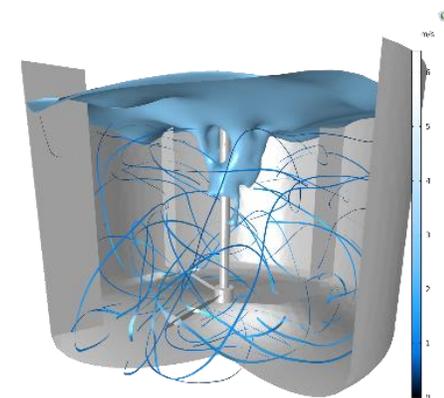


空间独立系统



理想混合体系

空间依赖系统

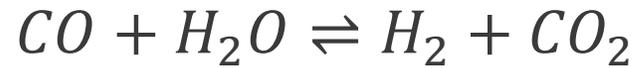
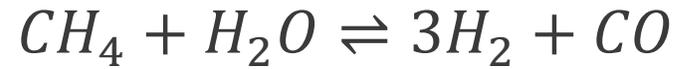


浓度及温度变量

# 用于完美混合体系的反应工程接口

# 反应模型

- 蒸汽重整



- 质量作用定律或用户定义动力学

- 吸热反应

- 需要外部热源维持反应温度

- 最后一步

- 热力学数据

# 完美混合体系

2. 输入化学方程时, 自动生成物质平衡

预定义了间歇式、半间歇式、全混流反应器与平推流反应器等模型

The screenshot displays the COMSOL Multiphysics interface for a chemical reaction model. The left panel, '模型开发器' (Model Builder), shows a hierarchical tree structure. Under '反应工程: 反应工程 (re) (re)', reaction '反应: 2: CO + H2O <=> H2 + CO2 (rch2)' is selected. This reaction is associated with substances: CO (CO), H2O (H2O), H2 (H2), and CO2 (CO2). The right panel, '设置' (Settings), shows the configuration for this reaction. The '反应' (Reaction) section has the label '2: CO + H2O <=> H2 + CO2'. The '反应式' (Reaction) section shows the chemical equation 'CO+H2O<=>H2+CO2' and the reaction type '可逆' (Reversible). The '反应速率' (Reaction Rate) section is set to '质量作用定律' (Mass Action Law), with the rate equation 
$$r_j = k_j^f \prod_{i \in \text{react}} c_i^{y_{ij}} - k_j^r \prod_{i \in \text{prod}} c_i^{y_{ij}}$$
 and total reaction orders of 2 for both forward and reverse directions. The '速率常数' (Rate Constants) section has '指定平衡常数' (Specify Equilibrium Constant) checked, and the forward rate constant is set to  $k^f = 1$  with units  $\text{m}^3/(\text{s}\cdot\text{mol})$ . The '平衡设置' (Equilibrium Settings) section is also visible.

1. 输入化学反应式

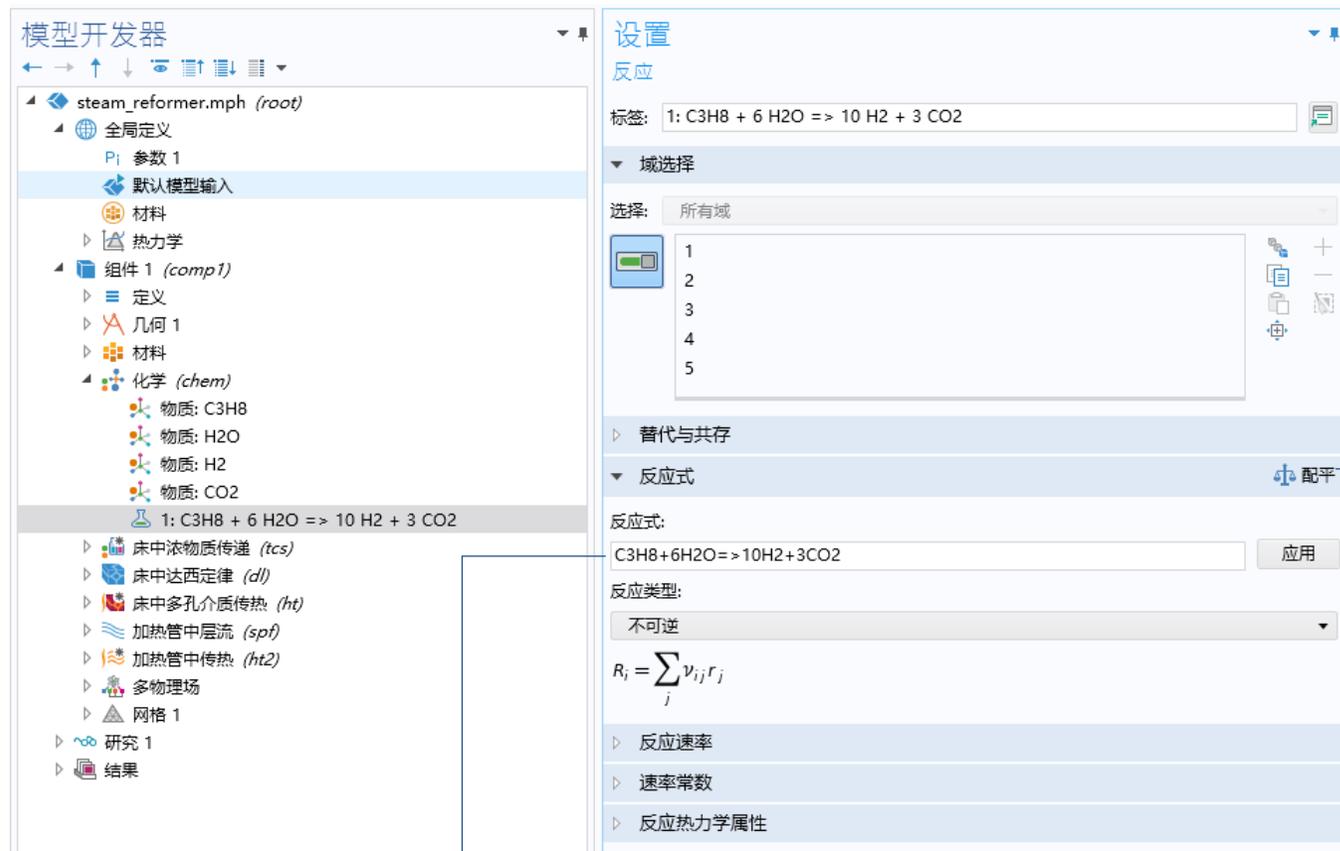
3. 基于质量作用定律, 自动生成反应动力学, 也可以使用自定义表达式替代速率定律

4. 根据动力学表达式自动生成速率常数单位

# 反应配平和反应动力学

# 反应配平

- 计量平衡
  - 原子自动配平
  - 元素符号来自元素周期表
- 配平按钮
  - 计算计量系数



键入反应

执行配平

# 摩尔质量

- 自动摩尔质量定义
  - 假设物质的命名与化学反应式相同
  - 使用元素周期表中的元素符号<sup>1</sup>
- 新的默认设置
  - 创建时自动定义
    - 反应创建的物质
    - 手动添加的物质
    - 物质组的子节点
  - 无法自动定义时，使用  $M = 0 \text{ g/mol}$
  - 当存在摩尔质量为零的物质时，求解器序列出现报警节点

模型开发者

根节点: steam\_reformer.mph (root)

- 全局定义
- 组件: Component 1 (comp1)
  - 定义
  - 几何: Geometry 1
  - 材料
  - 化学: Chemistry (chem)
    - 物质: Species: C3H8
    - 物质: Species: H2O
    - 物质: Species: H2
    - 物质: Species: CO2
    - 反应: 1: C3H8 + 6 H2O => 10 H2 + 3 CO2
  - 浓物质传递: Transport of Concentrated Species in Bed (tcs)
  - 达西定律: Darcy's Law in Bed (dl)
  - 多孔介质传热: Heat Transfer in Porous Media in Bed (ht)
  - 层流: Laminar Flow in Heating Tubes (spt)
  - 流体传热: Heat Transfer in Heating Tubes (ht2)
  - 多物理场
  - 网格: Mesh 1
- 研究: Study 1
- 结果: 结果

设置

物质

标签: Species: C3H8

域选择

选择: 所有域

物质名称

C3H8 应用

物质类型

本体物质

广义参数

摩尔质量:

用户定义

摩尔质量:

M 0.032[kg/mol] kg/mol

电荷:

z 0 1

自动定义:  $M_{\text{C3H8}} = 3M_{\text{C}} + 8M_{\text{H}}$

# 反应级数

## ■ 质量作用定律

- 自动计算反应级数
- 从化学反应式获取
- 在用户界面中显示
- 速率常数单位从反应速率和反应级数推导

模型开发者

根节点: steam\_reformer.mph (root)

- 全局定义
- 组件: Component 1 (comp1)
  - 定义
  - 几何: Geometry 1
  - 材料
  - 化学: Chemistry (chem)
    - 物质: Species: C3H8
    - 物质: Species: H2O
    - 物质: Species: H2
    - 物质: Species: CO2
    - 反应: 1: C3H8 + 6 H2O <=> 10 H2 + 3 CO2
  - 浓物质传递: Transport of Concentrated Species in Bed (tcs)
  - 达西定律: Darcy's Law in Bed (dl)
  - 多孔介质传热: Heat Transfer in Porous Media in Bed (ht)
  - 层流: Laminar Flow in Heating Tubes (spf)
  - 流体传热: Heat Transfer in Heating Tubes (ht2)
  - 多物理场
  - 网格: Mesh 1
- 研究: Study 1
- 结果: 结果

键入化学反应式

获取反应级数,  
存在非物理实际的可能!

速率常数单位从反应速率和反应级数推导

设置

反应

标签: 1: C3H8 + 6 H2O <=> 10 H2 + 3 CO2

域选择

反应式 平衡

反应式: C3H8+6H2O<=>10H2+3CO2 应用

反应类型: 可逆

$$R_i = \sum_j \nu_{ij} r_j$$

反应速率

质量作用定律

$$r_j = k_j^f \prod_{i \in \text{react}} c_i^{\nu_{ij}} - k_j^r \prod_{i \in \text{prod}} c_i^{\nu_{ij}}$$

总正反应级数: 7  
总逆反应级数: 13

速率常数

指定平衡常数  
 使用阿累尼乌斯表达式

正反应速率常数:  $k^f$  1  $\text{m}^{12}/(\text{s}\cdot\text{mol}^6)$

逆反应速率常数:  $k^r$  1  $\text{m}^{35}/(\text{s}\cdot\text{mol}^{12})$

# 反应级数

- 用户定义反应速率
  - 设置反应级数
  - 速率常数单位从反应速率和反应级数推导

模型开发器

根节点: steam\_reformer.mph (root)

- 全局定义
- 组件: Component 1 (comp1)
  - 定义
  - 几何: Geometry 1
  - 材料
  - 化学: Chemistry (chem)
    - 物质: Species: C3H8
    - 物质: Species: H2O
    - 物质: Species: H2
    - 物质: Species: CO2
    - 反应: 1: C3H8 + 6 H2O <=> 10 H2 + 3 CO2
  - 浓物质传递: Transport of Concentrated Species in Bed (tcs)
  - 达西定律: Darcy's Law in Bed (dl)
  - 多孔介质传热: Heat Transfer in Porous Media in Bed (ht)
  - 层流: Laminar Flow in Heating Tubes (spf)
  - 流体传热: Heat Transfer in Heating Tubes (ht2)
  - 多物理场
  - 网格: Mesh 1
- 研究: Study 1
- 结果: 结果

切换到用户定义  
编辑反应速率  
给定反应级数

速率常数单位从反应速率和反应级数推导

设置

反应

域选择

反应式 平衡

反应式:  
C3H8+6H2O<=>10H2+3CO2 应用

反应类型:  
可逆

$$R_j = \sum_j \nu_{ij} r_j$$

反应速率

用户定义

$r_j$  chem.kf\_1\*chem.c\_C3H8\*chem.c mol/(m<sup>3</sup>·s) 重置为默认设置

— 体积总反应级数 —

向前:  
1

逆:  
1

速率常数

指定平衡常数

使用阿累尼乌斯表达式

正反应速率常数:  
 $k^f$  1 1/s

逆反应速率常数:  
 $k^r$  1 1/s

# 热力学属性数据库

# 热力学属性数据库

1. 添加热力学系统

在此阶段，热力学属性包与反应工程接口中的组分列表是分离的。

模型开发器

- 根节点: Untitled.mph (root)
  - 全局定义
    - 参数: 参数
      - 热力学: 热力学 (thermo)
        - 属性包: 属性包 1 (pp1) (pp1)
  - 材料: 材料
    - 组件: 组件 1 (comp1) (comp1)
      - 定义
  - 反应工程: 反应工程 (re) (re)
    - 初始值: 初始值 1 (inits1)
    - 反应: 1:  $a+b \rightleftharpoons 3c+d$  (rch1)
    - 物质: Species: a (a)
    - 物质: Species: b (b)
    - 物质: Species: c (c)
    - 物质: Species: d (d)
    - 反应: 2:  $d+b \rightleftharpoons c+e$  (rch2)
    - 物质: Species: e (e)
    - 方程视图: 方程视图 (info)
  - 研究: 研究 1 (std1)
    - 步骤 1: 瞬态: 瞬态 (time)
    - 求解器配置
      - 解: 解 1 (sol1) (sol1)
      - 作业配置
  - 结果: 结果
    - 数据集: 数据集
      - 派生值: 派生值
      - 表格: 表格
    - 一维绘图组: 浓度 (pg1)
    - 一维绘图组: 一维绘图组 2 (pg2)
    - 全局: 全局 1 (glob1)
    - 导出: 导出
    - 报告: 报告

设置

属性包

标签: 属性包 1

提供者

物质

名称	CAS	反应式	数据库
methane	74-82-8	CH4	COMSOL
water	7732-18-5	H2O	COMSOL
carbon di...	124-38-9	CO2	COMSOL
carbon m...	630-08-0	CO	COMSOL
hydrogen	1333-74-0	H2	COMSOL

相位

名称	状态
Gas	Vapor

物质属性

混合物属性

热力学模型

热力学模型: 理想气体

属性模型

二元相互作用参数

2. 从数据库中添加组分

3. 选择混合物状态

4. 选择热力学模型

# 热力学属性，物质匹配

1. 选择反应工程节点

此时，属性包与化学反应工程接口的物质列表相耦合。

The screenshot shows the 'Model Builder' window on the left and the 'Settings' window on the right. The 'Model Builder' window displays a tree view of the model structure. The 'Settings' window is titled '反应工程' (Reaction Engineering) and shows various configuration options. The '物质匹配' (Material Matching) section is expanded, showing a table with columns '物质' (Material) and '来自热力学' (From Thermodynamics). The table lists materials a, b, c, d, and e, which are mapped to CH4, H2O, H2, CO, and CO2 respectively.

物质	来自热力学
a	CH4
b	H2O
c	H2
d	CO
e	CO2

2. 激活能量平衡功能

3. 将热力学属性包的物质与反应工程接口的物质相匹配

备注：可以直接从热力学属性库直接生成化学接口

# 热力学属性数据库

## ■ 可计算的参数和模型

- 反应热
- 生成热
- 热容
- 粘性
- 密度
- 热导率
- 双组分扩散系数
- 活度和逸度系数

## ■ 液体混合物

## ■ 气体混合物

## ■ 气-液、气-液-液，以及液-液混合物的平衡计算

气体混合物的属性模型举例

The screenshot displays the '混合物属性' (Mixture Properties) settings in COMSOL. It is divided into three sections: '混合物属性' (Mixture Properties), '热力学模型' (Thermodynamic Model), and '属性模型' (Property Model). The '热力学模型' section shows '气相模型' (Gas Model) set to 'Peng-Robinson'. The '属性模型' section shows a table with columns '属性' (Property) and '模型' (Model). The '气体热导率' (Gas Thermal Conductivity) is set to '动力学理论' (Kinetic Theory), and '气体粘度' (Gas Viscosity) is set to 'Brokaw'. A dropdown menu is open for '二元相互作用参数' (Binary Interaction Parameters), showing options: '无' (None), 'Wilke', 'Brokaw', 'Wilke (含高压修正)' (Wilke with high pressure correction), 'Brokaw (含高压修正)' (Brokaw with high pressure correction), and 'Pedersen 对应状态模型' (Pedersen corresponding state model).

属性	模型
气体热导率	动力学理论
气体粘度	Brokaw

二元相互作用参数

- 无
- Wilke
- Brokaw
- Wilke (含高压修正)
- Brokaw (含高压修正)
- Pedersen 对应状态模型

# 数据库中的热力学模型

## ■ 气体混合物

- 理想气体
- Peng-Robinson
- Peng-Robinson (Twu)
- Soave-Redlich-Kwong
- Soave-Redlich-Kwong (Graboski-Daubert)

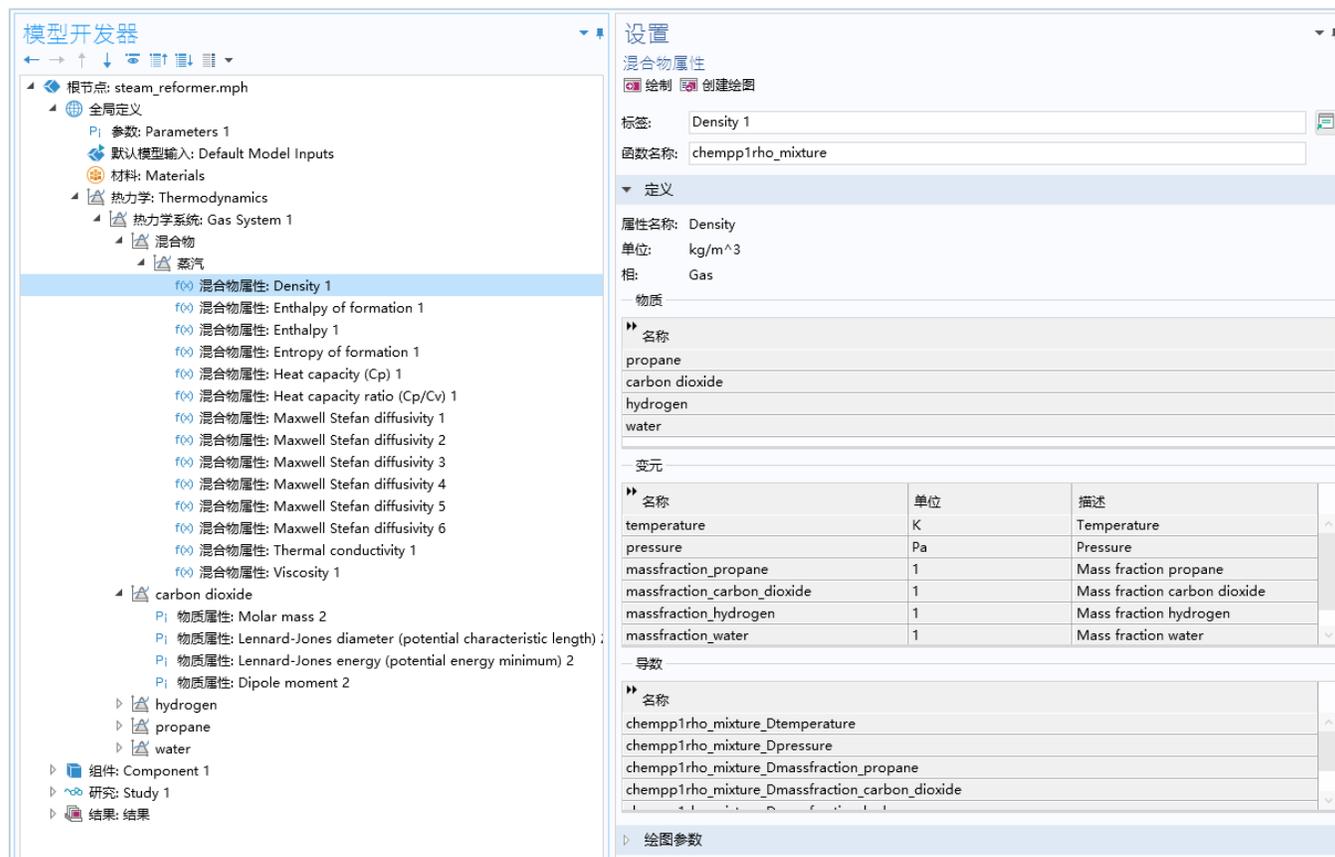
## ■ 液体混合物

- Chao-Seader (Grayson-Streed)
- Wilson
- NRTL
- UNIFAC VLE
- UNIQUAC
- 常规溶液
- 扩展的常规溶液
- 理想溶液

# 使用热力学属性

# 热力学属性

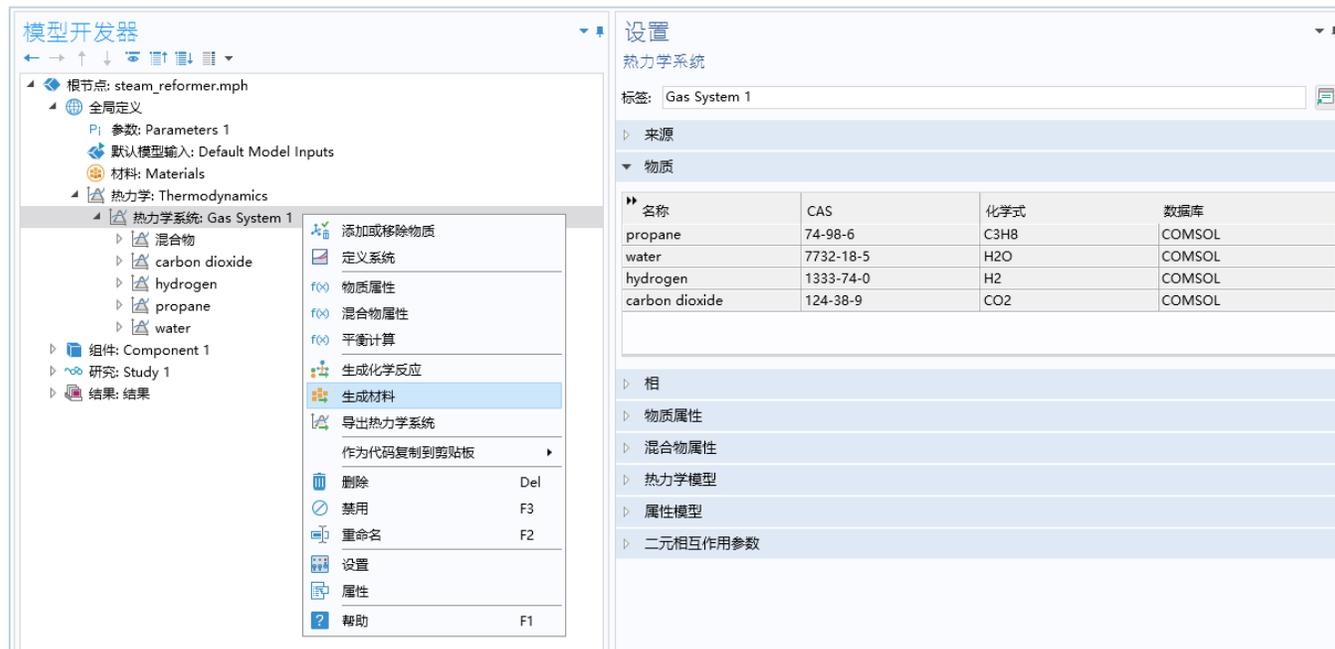
- 手动创建函数
  - 热力学系统中添加函数节点
- 通过热力学属性定义材料
  - 使用“生成材料”
  - 自动添加所需属性
- 耦合反应接口
  - 反应工程和化学接口可以与热力学系统耦合
  - 自动添加所需属性



函数和参数会以节点的形式在系统中创建，选择节点即可查看物质名称、属性单位和变元

# 热力学属性

- 手动创建函数
  - 热力学系统中添加函数节点
- 通过热力学属性定义材料
  - 使用“生成材料”
  - 自动添加所需属性
- 耦合反应接口
  - 反应工程和化学接口可以与热力学系统耦合
  - 自动添加所需属性



生成材料向导可以从热力学系统的选项菜单启动。完成相关步骤后，包含热力学数据的数据材料即被创建。

# 热力学属性

- 手动创建函数
  - 热力学系统中添加函数节点
- 通过热力学属性定义材料
  - 使用“生成材料”
  - 自动添加所需属性
- 耦合反应接口
  - 反应工程和化学接口可以与热力学系统耦合
  - 自动添加所需属性

The screenshot displays the COMSOL Multiphysics interface. The left pane, titled '模型开发器' (Model Builder), shows a hierarchical tree structure for a model named 'steam\_reformer.mph'. The '热力学' (Thermodynamics) node is expanded, showing a '热力学系统: Gas System 1' (Thermodynamic System: Gas System 1) with sub-nodes for '混合物' (Mixture), 'carbon dioxide', 'hydrogen', 'propane', and 'water'. Below this, the '化学: Chemistry' node is expanded, showing '物质: Species: C3H8', '物质: Species: H2O', '物质: Species: H2', '物质: Species: CO2', and a reaction: '反应: 1: C3H8 + 6 H2O => 10 H2 + 3 CO2'. Other nodes include '浓物质传递: Transport of Concentrated Species in Bed', '达西定律: Darcy's Law in Bed', '多孔介质传热: Heat Transfer in Porous Media in Bed', '层流: Laminar Flow in Heating Tubes', '流体传热: Heat Transfer in Heating Tubes', '多物理场', '网格: Mesh 1', '研究: Study 1', and '结果: 结果'.

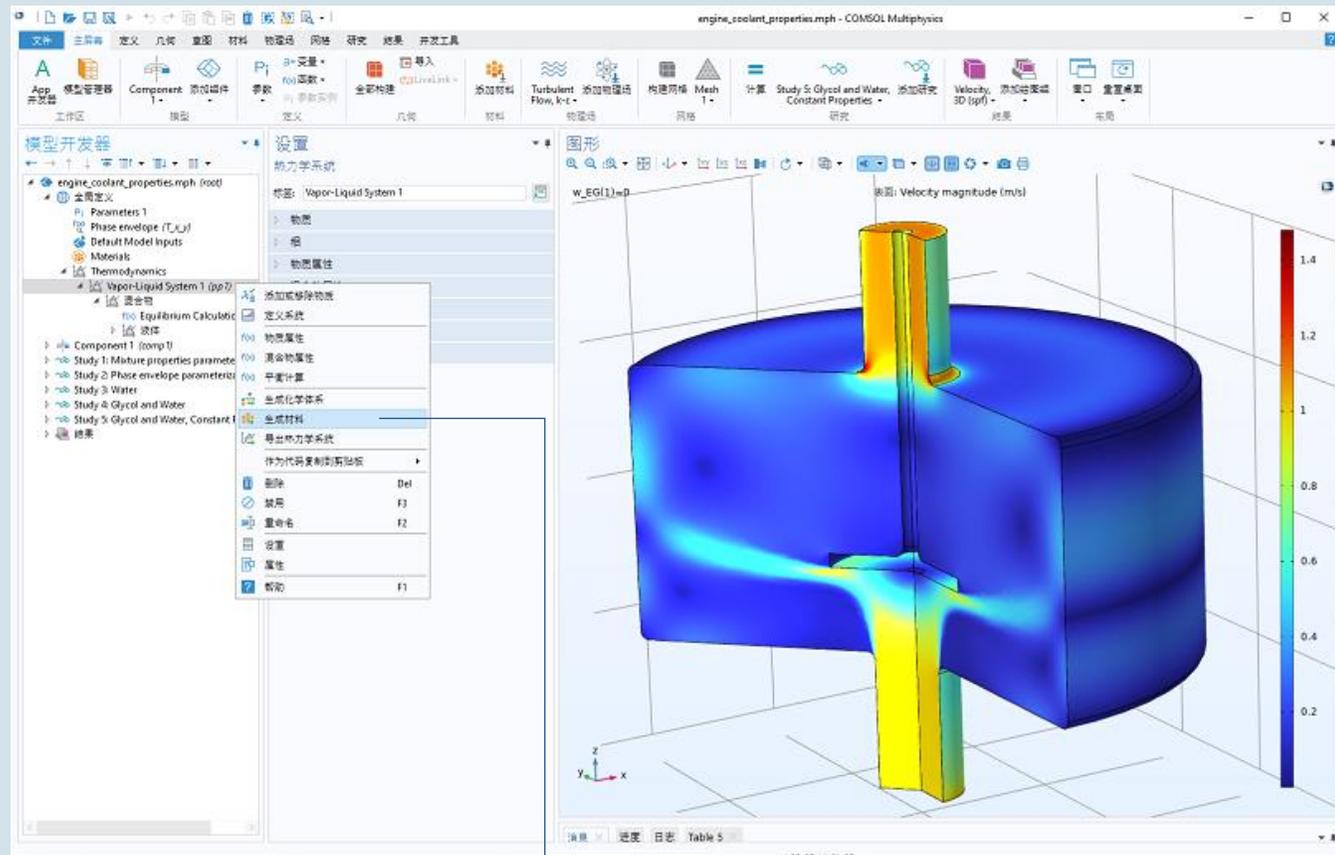
The right pane, titled '设置' (Settings), shows the configuration for the 'Chemistry' node. The '名称' (Name) is 'chem'. Under '混合物属性' (Mixture Properties), the '类型' (Type) is set to '浓物质' (Concentrated Species). The '热力学' (Thermodynamics) checkbox is checked, and the '热力学系统' (Thermodynamic System) is set to '热力学系统: Gas System 1'. The '相' (Phase) is set to '气体' (Gas), and the '密度' (Density) is set to '热力学' (Thermodynamics). Under '物质匹配' (Species Matching), a table lists the species and their properties:

物质	物质质量分数类型	质量分数 (1)	来自热力学
C3H8	Variable	w_C3H8	C3H8
CO2	Variable	w_CO2	CO2
H2	Variable	w_H2	H2
H2O	Variable	w_H2O	H2O

当二者耦合时，混合物和所有组分所需的物性由热力学系统计算得到。

# 生成材料

- 气体或液体多组分体系中组分含量不变，但属性随温度和压力变化
- 任意混合物的粘性、密度、导热系数和热容
- 这些属性可以用于流场以及传热分析



从热力学数据库中生成材料

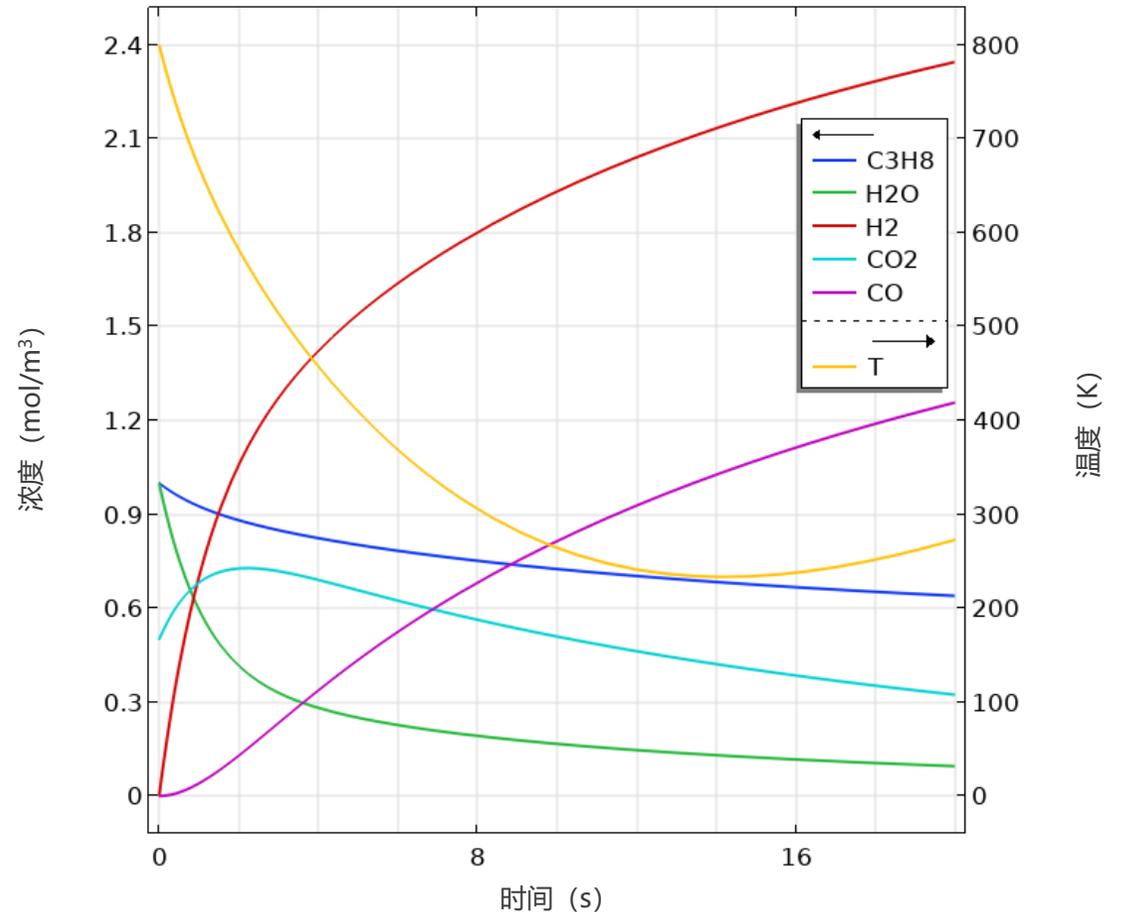
# 预定义系统

- 三个可选系统
  - 干空气
  - 湿空气
  - 水-水蒸气
- 两步创建材料
  - 创建体系
  - 生成材料
- 湿空气支持相对湿度定义



# 结果：完美混合系统

- 瞬态研究
  - 物质守恒
  - 能量守恒
- 理想反应器类型
  - 间歇式反应器
  - 全混流反应器
  - 半间歇性反应器
  - 平推流
- 热力学属性来自内部数据库
- 传递数据可用于空间依赖模型



物质浓度与温度随时间的变化

# 生成空间依赖模型

# 生成空间依赖模型

1. 添加生成空间依赖模型节点

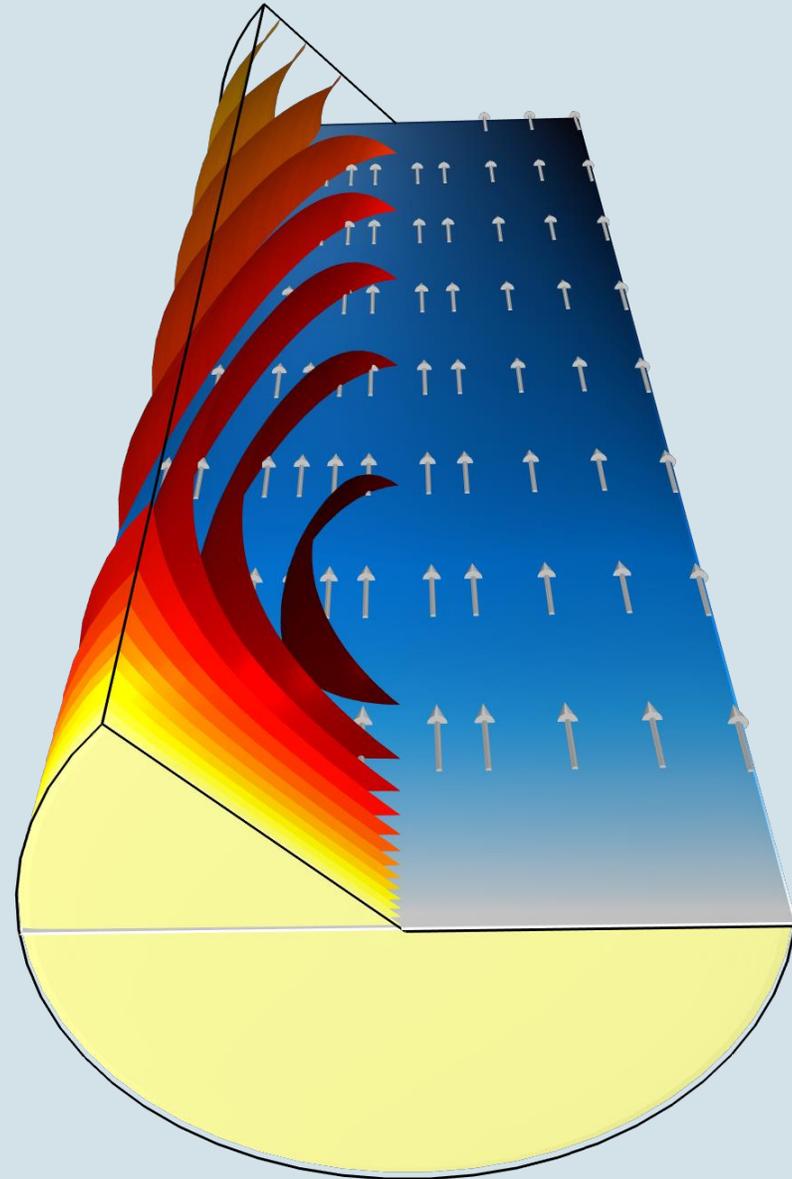
The screenshot displays the COMSOL Multiphysics software interface. On the left is the 'Model Builder' (模型开发者) panel, showing a hierarchical tree of model components. The 'Spatially Dependent Model' (生成空间依赖性模型) node is highlighted. On the right is the 'Settings' (设置) panel for this model, which includes a 'Tag' (生成空间依赖性模型 1), a 'Create/Refresh' (创建/刷新) button, and several dropdown menus for configuration: 'Spatially Dependent Model Production' (空间依赖模型产生) set to '2D Axisymmetric' (二维轴对称), 'Component Settings' (分量设置) set to '2D Axisymmetric' (二维轴对称), 'Physics Interface' (物理场接口) set to 'Concentration Transport' (浓物质传递), and 'Study Type' (研究类型) set to 'Steady State' (稳态).

2. 选择空间维度

3. 选择传递接口类型

# 空间依赖模型

- 热力学和传递数据来自 0 维模型中引用的数据库
  - 反应焓
  - 热容
  - 导热系数
  - 密度
  - 粘性
  - 双组份扩散系数
  - 物质属性（摩尔质量等）
- 反应工程接口中的反应动力学



管式丙烷蒸汽重整反应器中的温度等值面、速度和氢气质量分数分布

# 反应流

- 支持等温与非等温反应流
- 等温
  - 流体流动与质量传递
- 非等温
  - 化学接口（需要）提供
    - 溶质：摩尔质量，焓，扩散与传导系数
    - 混合物：密度、粘度、扩散、传导，反应热
  - 传热
    - 热平衡自洽包括焓扩散与反应热

设置  
反应流

标签: 反应流 1

名称: nirf1

域选择

方程

耦合接口

流体流动:

湍流, k- $\epsilon$  (spf)

物质传递:

浓物质传递 (tcs)

化学 (可选):

化学 (chem)

传热 (可选, 需要“化学”):

流体传热 (ht)

质量传递湍流模型

传热湍流模型

流体流动

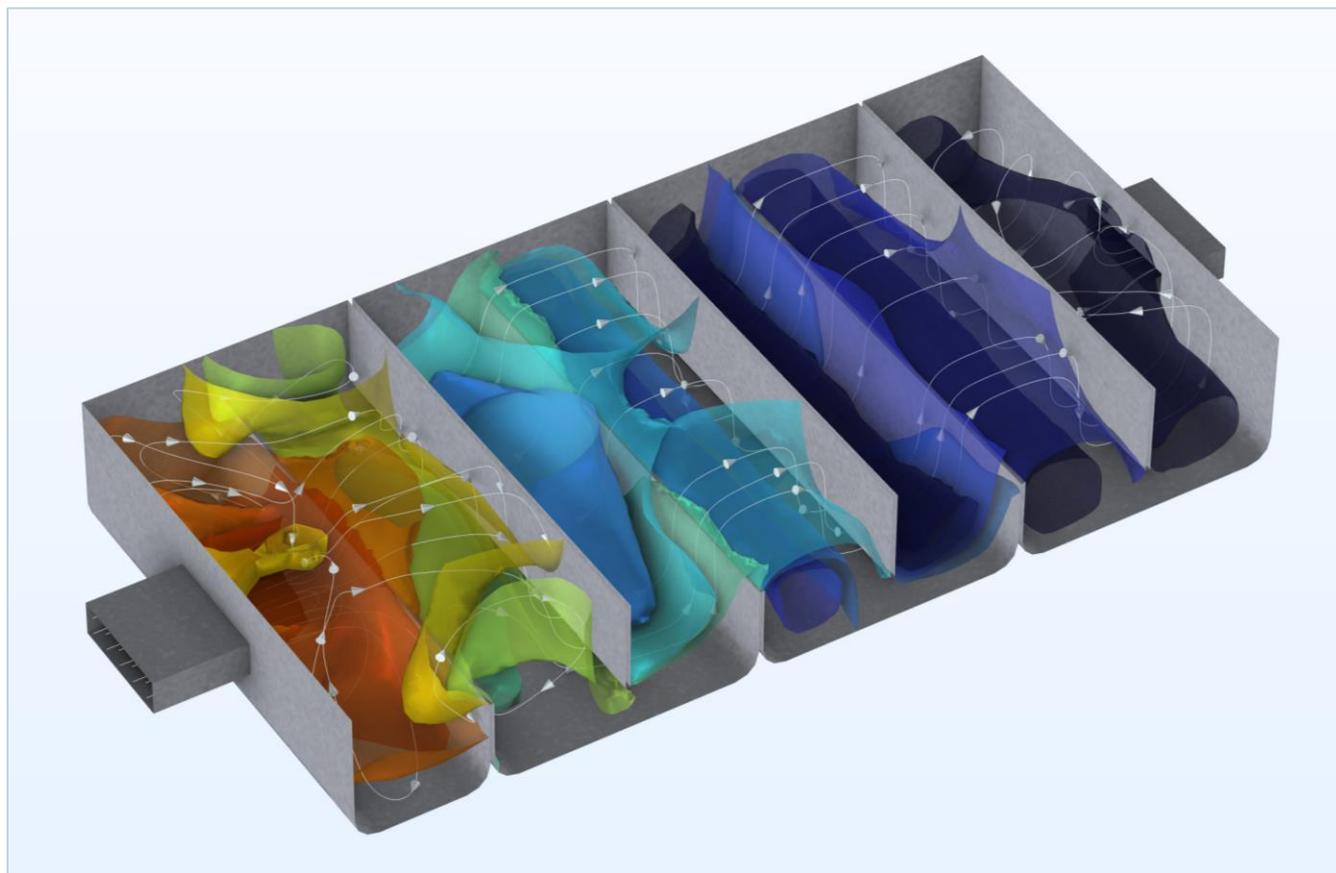
质量传递

反应, 物质属性与热力学

传热, 以及一致的反应热与焓扩散

# 湍流反应流

- 稀溶液或者浓混合物
- 湍流混合
  - Kays-Crawford
  - 高施密特数模型
  - 用户定义湍流施密特数
- 湍流依赖的反应速率
  - 涡耗散模型
- 质量传递壁函数



氯化池中的污染物演化，使用浓度等值面和流体流线进行后处理。

# 联合优化模块实现参数估值

# 参数估计

1. 添加参数估计节点

模型开发器

- 根节点: dna\_degradation.mph (root)
  - 全局定义
    - 参数: 参数
    - 材料: 材料
  - 组件: Component 1 (comp1) {comp1}
    - 定义
    - 反应工程: Reaction Engineering (re) {re1}
      - 初始值: Initial Values 1 (inits1)
      - 反应: 1: SC=>OC (rch1)
      - 物质: Species: SC (SC)
      - 物质: Species: OC (OC)
      - 反应: 2: OC=>L (rch2)
      - 物质: Species: L (L)
      - 反应: 3: L=>F (rch3)
      - 物质: Species: F (F)
      - 物质: Species: H2O (H2O)
      - 参数估计: Parameter Estimation 1**
    - 实验: Experiment 1 (exp1)
  - 研究: Study 1 (std1)
    - 优化: Optimization (opt)
    - 步骤 1: 瞬态: Time Dependent (time)
    - 求解器配置
    - 作业配置
  - 结果: 结果
    - 数据集: 数据集
    - 派生值: 派生值
    - 表格: 表格
    - 一维绘图组: Concentrations (pg1)
    - 导出: 导出
    - 报告: 报告

设置

参数估计

标签: Parameter Estimation 1

估算参数

参数	初始值	缩放	下界	上界
k1	1e-3	1		
k2	1e-3	1		
k3	1e-3	1		
c_S	10	1		

初始值:

缩放:

下界:

上界:

2. 选择需要估算的参数

3. 键入初始值和缩放

# 参数估计

4. 建立实验数据文件链接

模型开发器

根节点: dna\_degradation.mph (root)

- 全局定义
  - 参数: 参数
  - 材料: 材料
- 组件: Component 1 (comp1) {comp1}
  - 定义
  - 反应工程: Reaction Engineering (re) t
    - 初始值: Initial Values 1 (inits1)
    - 反应: 1: SC=>OC (rch1)
      - 物质: Species: SC (SC)
      - 物质: Species: OC (OC)
    - 反应: 2: OC=>L (rch2)
      - 物质: Species: L (L)
    - 反应: 3: L=>F (rch3)
      - 物质: Species: F (F)
      - 物质: Species: H2O (H2O)
  - 参数估计: Parameter Estimation 1
    - 实验: Experiment 1 (exp1)
- 研究: Study 1 (std1)
  - 优化: Optimization (opt)
  - 步骤 1: 瞬态: Time Dependent (time)
  - 求解器配置
  - 作业配置
  - 结果: 结果
    - 数据集: 数据集
    - 派生值: 派生值
    - 表格: 表格
    - 一维绘图组: Concentrations (pg1)
    - 导出: 导出
    - 报告: 报告

设置

实验

标签: Experiment 1

实验数据

文件名: dna\_degradation\_experiment1.csv

浏览... 导入

数据列	使用	模型变量	单位	权重
Time	<input checked="" type="checkbox"/>	t	1	1
Conc. SC	<input checked="" type="checkbox"/>	c_SC	1	1
Conc. OC	<input checked="" type="checkbox"/>	c_OC	1	1
Conc. L	<input checked="" type="checkbox"/>	c_L	1	1

模型变量:

单位:

权重:

实验参数

初始状态

5. 在数据列与模型变量间进行匹配

# 参数估计

6. 自动在研究中添加优化节点

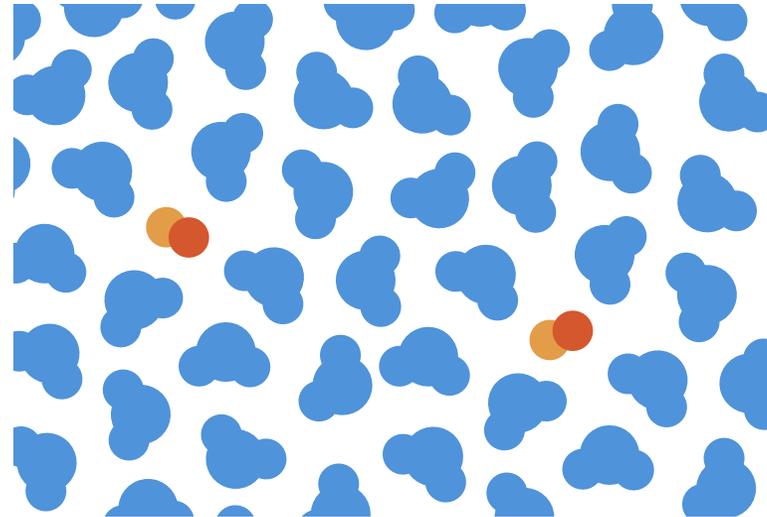
The screenshot displays the COMSOL Multiphysics interface. On the left, the '模型开发器' (Model Builder) panel shows a hierarchical tree of the model. The '研究: Study 1' (Study 1) node is expanded to show an '优化: Optimization' (Optimization) node. On the right, the '设置' (Settings) panel for the Optimization node is visible. The '优化求解器' (Optimization Solver) section is expanded, showing the '方法' (Method) dropdown menu set to 'Levenberg-Marquardt'. Other settings include '优化容差' (Optimization Tolerance) set to 1E-4, '研究步骤' (Study Step) set to '瞬态: Time Dependent (time)', and '最大模型计算数' (Maximum Number of Model Calculations) set to 1000. The '求解器配置' (Solver Configuration) section is also visible, showing '作业配置' (Job Configuration) and '结果: 结果' (Results) options.

7. 自动选取最优化方法

# 多组分传递

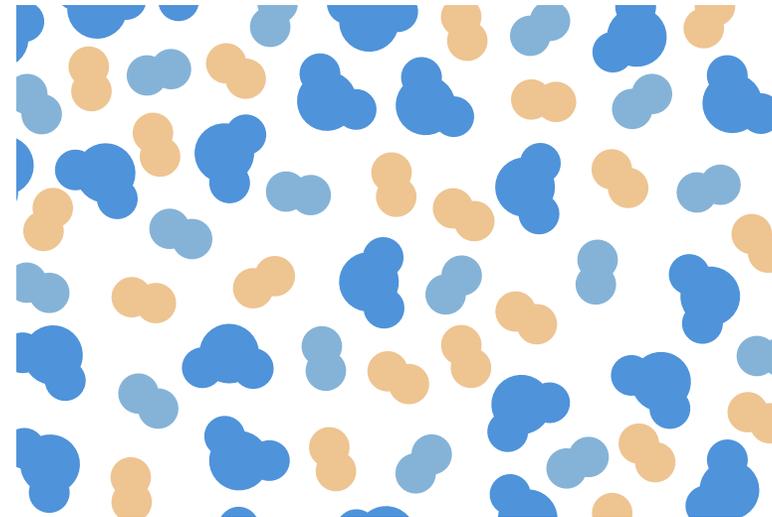
# 稀物质传递

- 溶质仅与溶剂存在相互作用
- 溶液密度等于溶剂密度
- 反应工程模块中的扩散模型
  - Fick 定律
  - 克努森和含尘气体



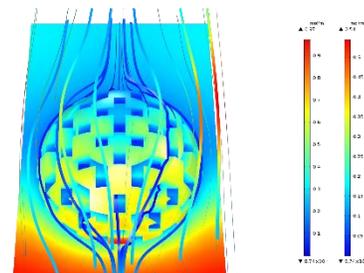
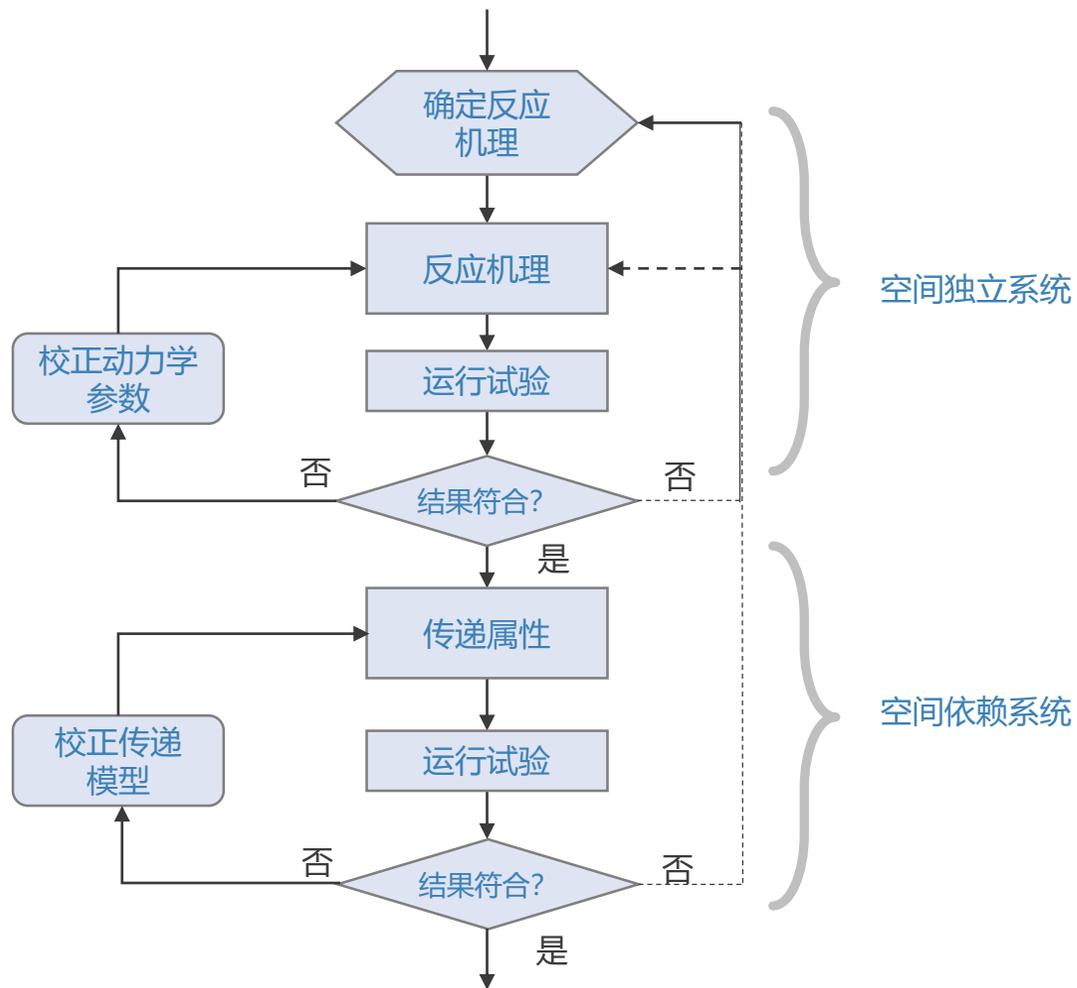
# 多组分溶液传递

- 所有组分间存在相互作用
- 溶液密度等于所有组分密度的加和
- 反应工程模块中的扩散模型
  - Maxwell-Stefan 定律
  - 混合物平均
  - 克努森和含尘气体

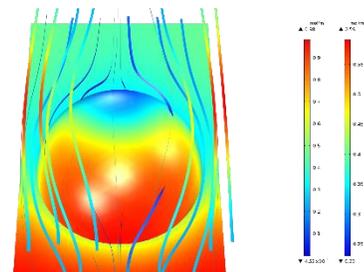


# 非均相催化

# 建模策略，非均相催化



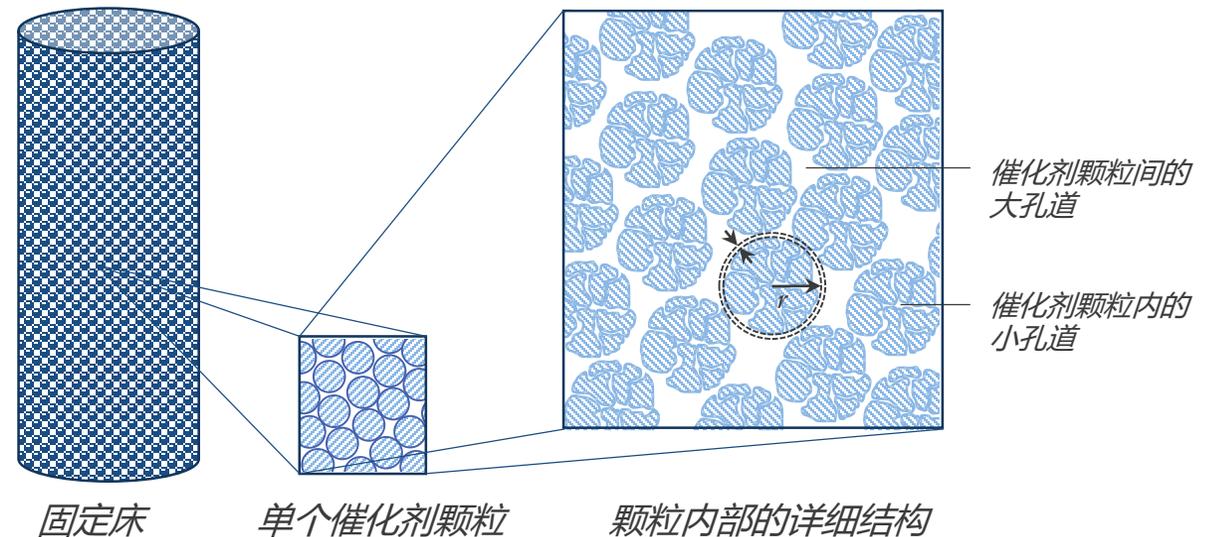
具有详细几何结构的模型



拟均相模型

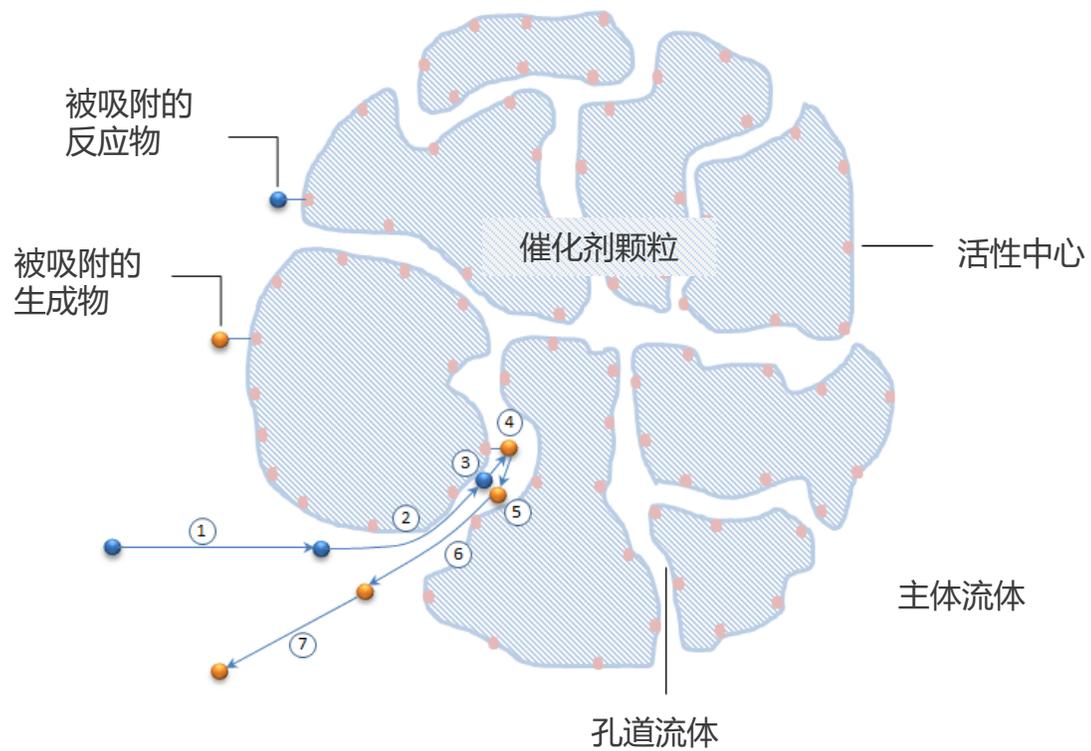
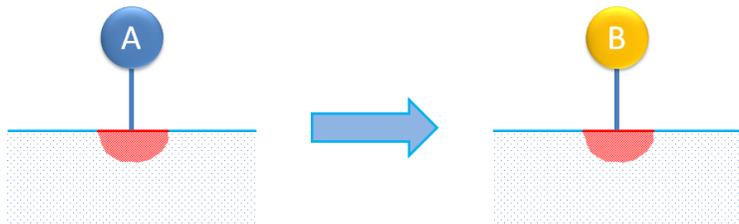
# 反应颗粒床

- 模拟由粗化颗粒填充的反应器
  - 固体颗粒（球，圆柱，或者薄片）
- 双重质量传递与反应
  - 宏观：颗粒间的孔道
  - 微观：颗粒内的孔道
- 反应颗粒床节点
  - 颗粒径向额外维度
    - 反应床上的每一个点
  - 颗粒间的扩散
    - 支持菲克定律、混合平均或 Maxwell-Stefan 扩散模型
  - 物质组分在颗粒间的对流
  - 任意的反应动力学
    - 可以使用反应接口定义



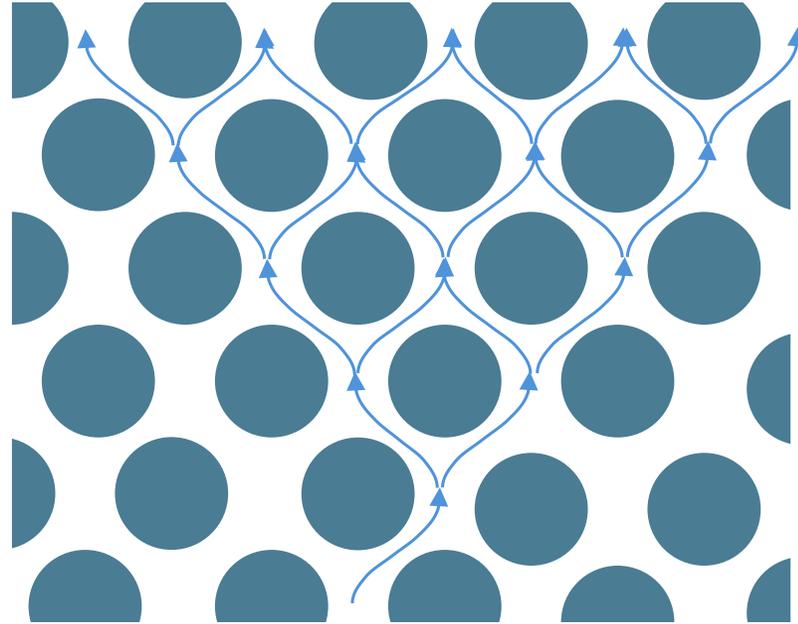
双孔道模型示意图

# 模型定义

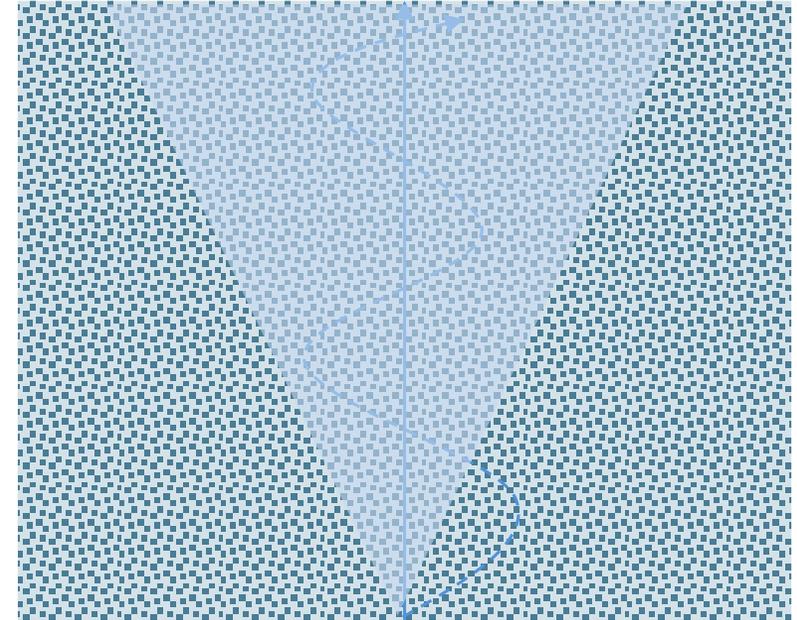


# 有效传递属性

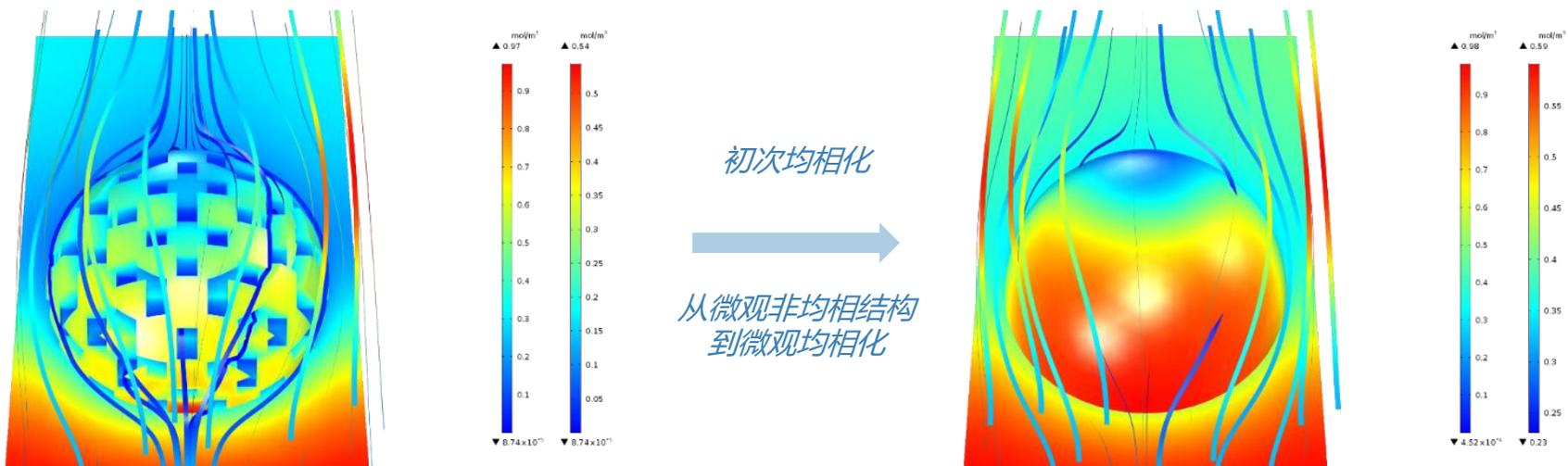
- 孔隙率
- 迂曲度
- 弥散
- 与壁面的相互作用



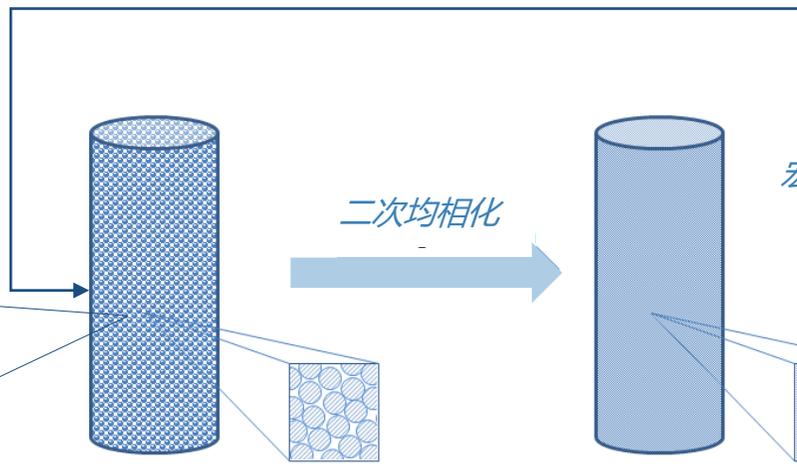
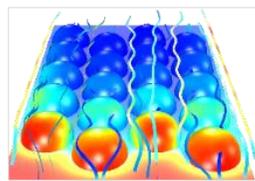
多孔结构



拟均相多孔结构



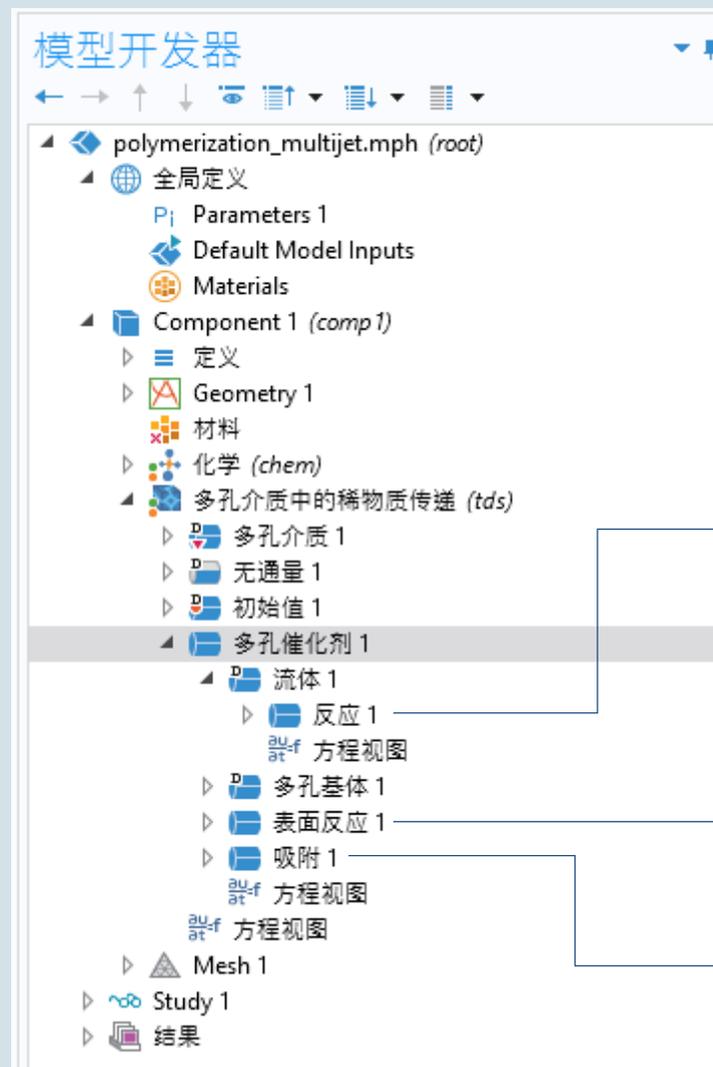
微观的均相化和宏观的非均相



宏观均相化和微观均相化

# 多孔催化

- 模拟多孔介质中的非均相反应与吸附/解吸反应
  - 矩阵，骨架或颗粒组成的大孔隙不是多孔结构
- 非均相体反应
  - 表面物质静止，是“多孔催化”节点的局部变量
  - 从化学节点获取反应机理
- 等温吸附
  - Langmuir、Freundlich、Toth、BET，等

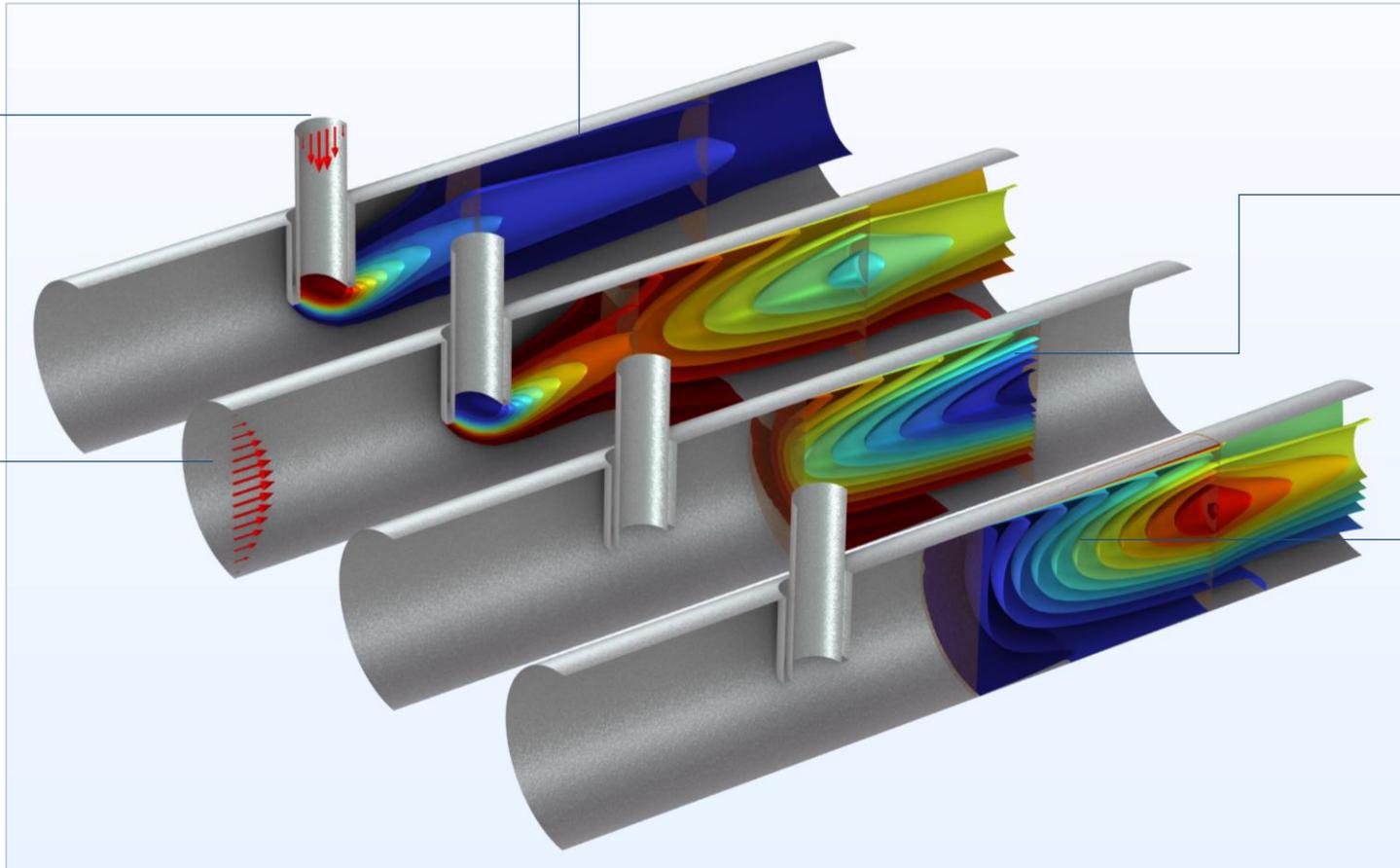


# 多孔催化

多孔催化部分

1. 从顶部入口注入物质 A

2. 从左部入口注入物质 B



3. 根据 Langmuir 等温模型计算吸附到基体表面的物质 B

$$c_{B,ads} = \frac{K_L c_{max} c_B}{1 - K_L c_B}$$

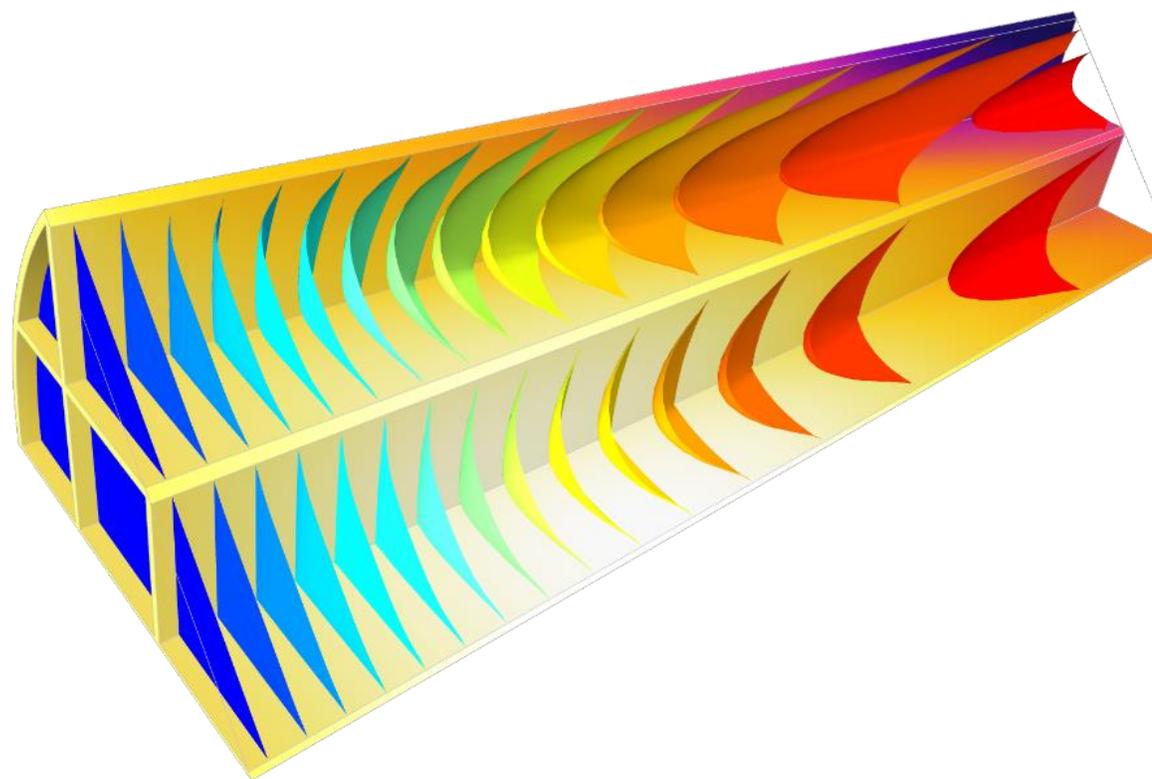
4. 表面结合的物质 B 与 A 反应生成 C



多孔催化特征用于研究微型反应器中的非均相催化反应。

# 总结

- 自由与多孔介质中的传递和反应
  - 反应动力学，均相与非均相反应
  - 热力学和传递属性
  - 多组分传递，传热与流体流动

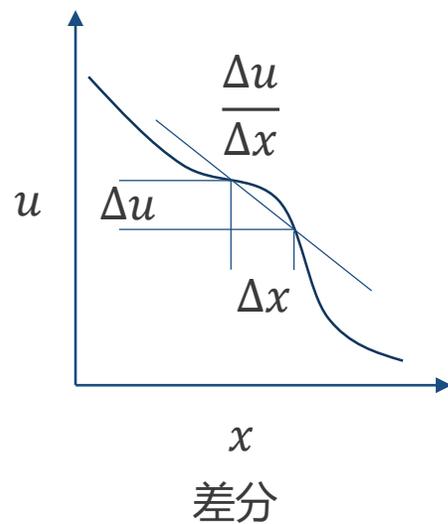


# 附录：基础篇

# 数学基础

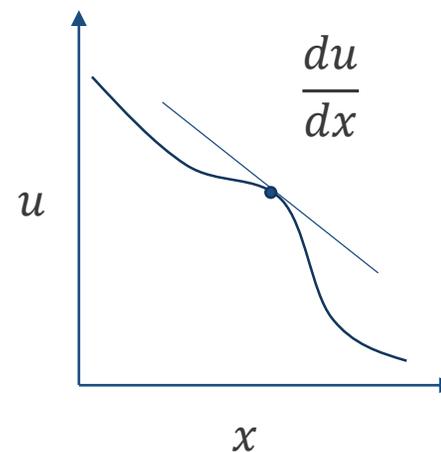
- 梯度

$$\nabla u = \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$



$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{du}{dx}$$

微分



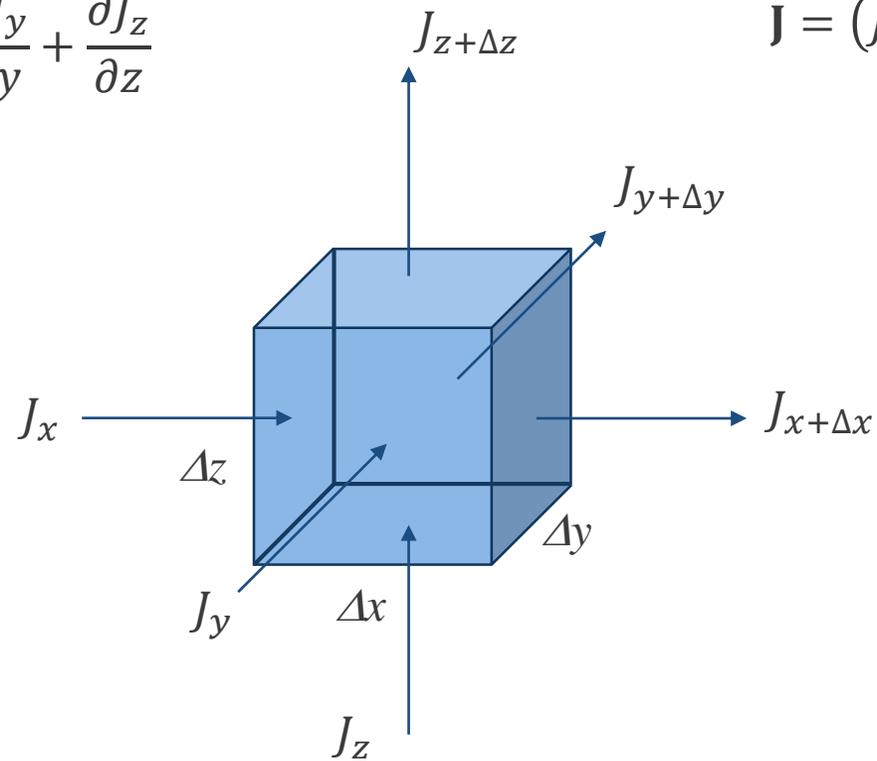
# 数学基础

- 散度

  - 矢量 (张量) 守恒

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$

$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$$



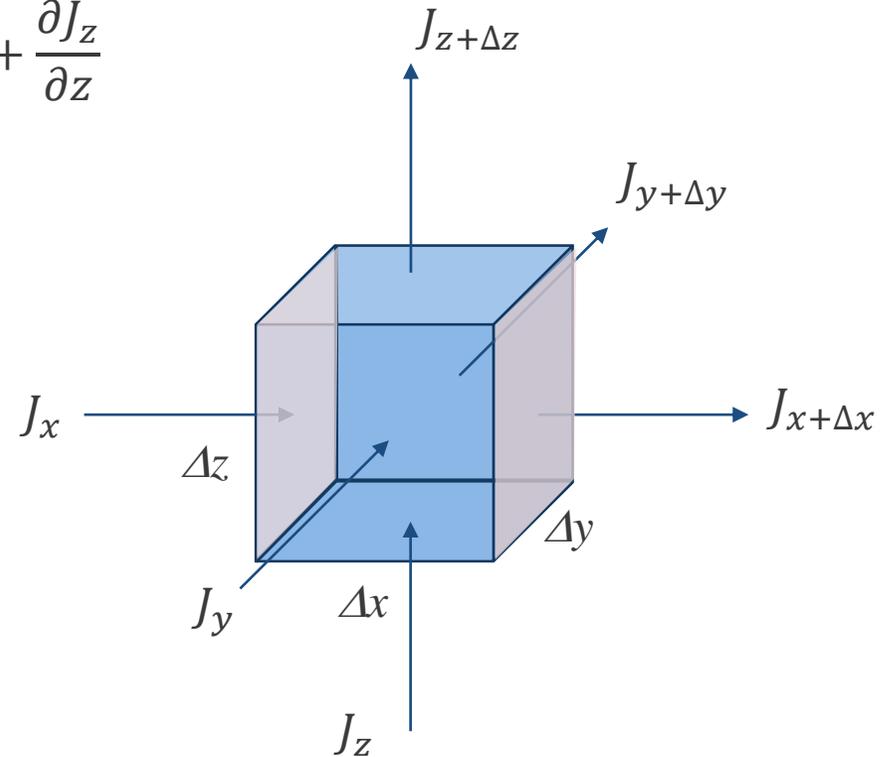
# 数学基础

## ■ 散度

— 矢量（张量）守恒

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$

$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$$

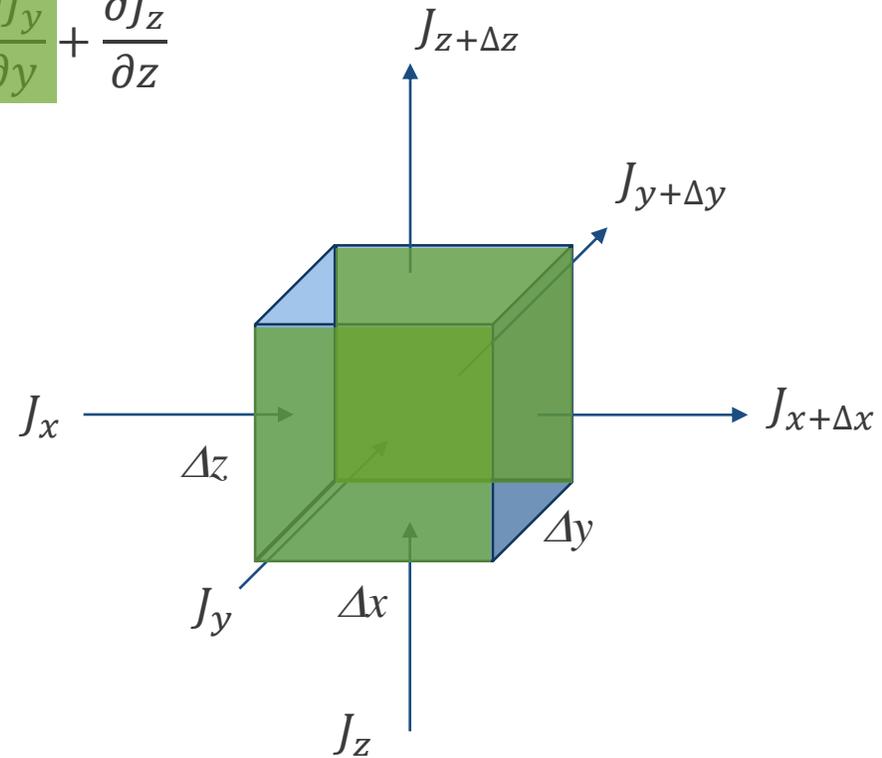


# 数学基础

## 散度

— 矢量 (张量) 守恒

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$



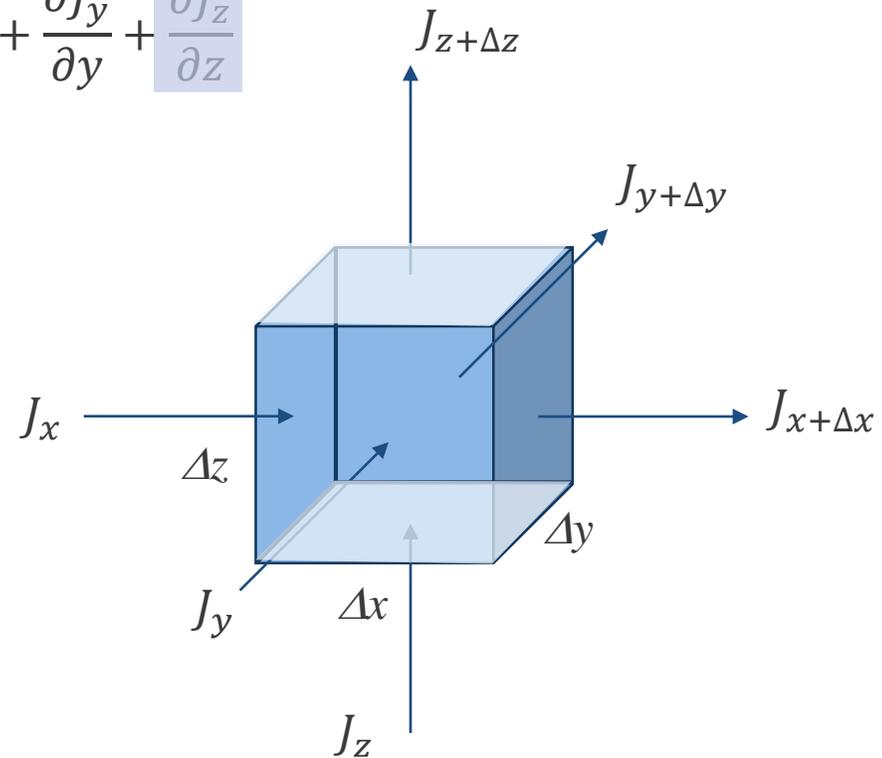
$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$$

# 数学基础

## ■ 散度

— 矢量 (张量) 守恒

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$

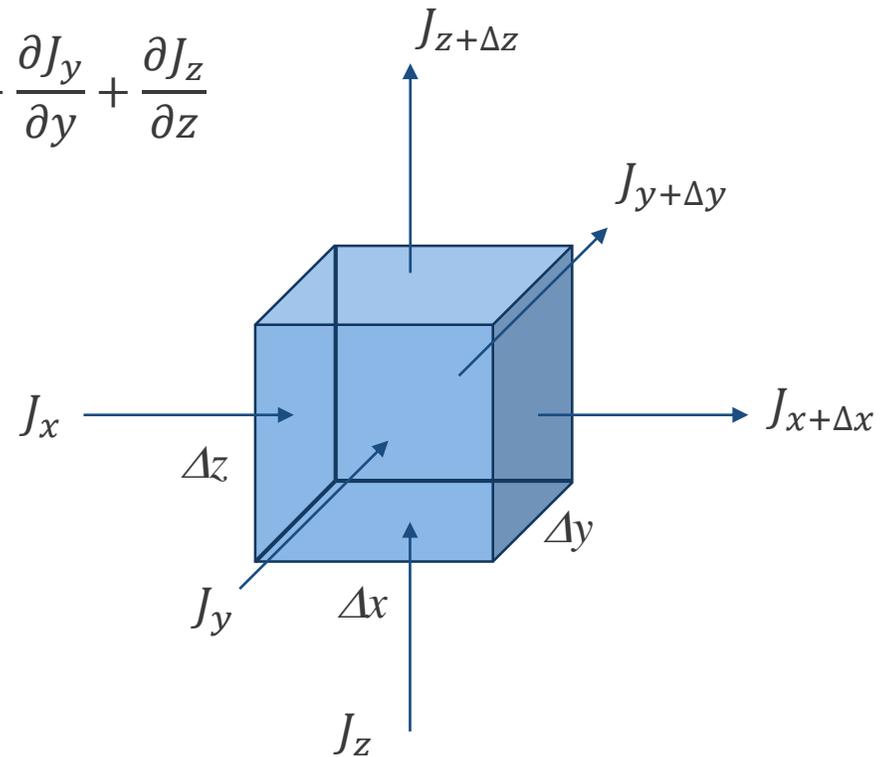


$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$$

# 数学基础

- 散度
  - 矢量 (张量) 守恒

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}$$



$$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$$

# 传递第一定律

- 动量传递

$$\boldsymbol{T} = -\mu \nabla \mathbf{u}$$

- 热量传递

$$\boldsymbol{q} = -k \nabla T$$

- 质量传递

$$\mathbf{j}_A = -D_A \nabla c_A$$

- 动能

- 牛顿定律

- 热能

- 傅里叶定律

- 化学能

- Fick 定律

# 传递第二定律

- 动量守恒

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} - \nabla p$$

- NS 方程

- 能量守恒

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \phi_\mu - r \Delta H_{rxn}$$

- 傅里叶第二定律

- 质量守恒

$$\frac{Dc_A}{Dt} = \nabla \cdot (D_A \nabla c_A) + v_A r$$

- Fick 第二定律

# 传递第二定律

- 质点导数（全微分）

$$\frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\varphi$$

- 质量传递

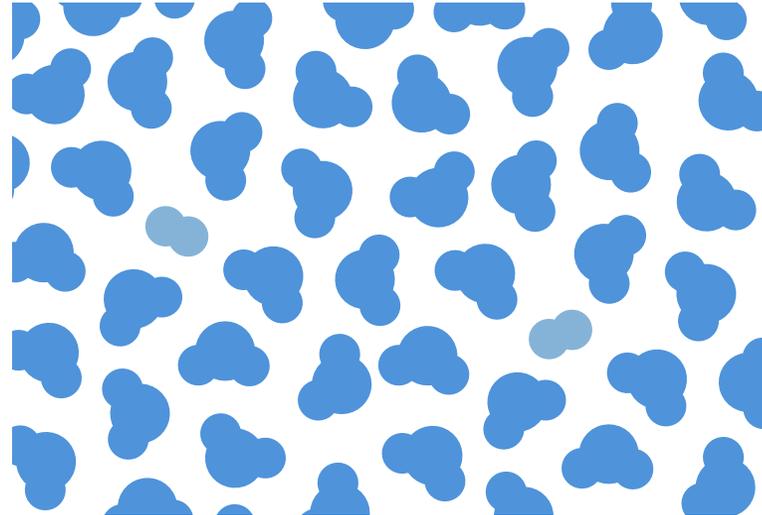
$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c_A = \nabla \cdot (D_A \nabla c_A) + v_A r$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_A \nabla c_A + c_A \mathbf{u}) - v_A r = 0$$

# 多组分传递

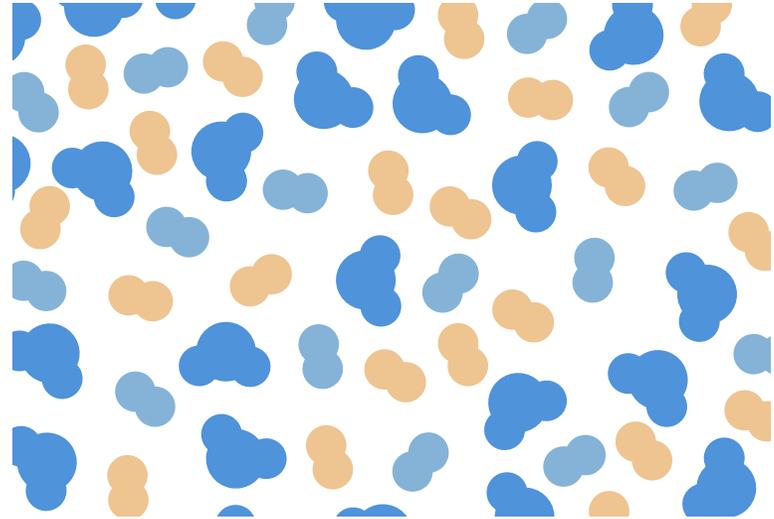
# 稀物质传递

- 溶质仅与溶剂存在相互作用
- 溶液密度等于溶剂密度



# 浓物质传递

- 所有组分间存在相互作用
- 溶液密度等于所有组分密度的加和



# 驱动力

- 化学能梯度

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{F}_i = -RT\nabla\ln(a_i) & \xrightarrow{\text{理想溶液}} & \mathbf{F}_i = -RT\frac{1}{x_i}\nabla x_i \\ \uparrow \quad \quad \quad \uparrow & & \quad \quad \quad \uparrow \\ \text{驱动力} \quad \quad \quad \text{活度} & & \text{摩尔分数} \end{array}$$

# 摩擦力

- 溶液中组分间的相互作用

$$\mathbf{F}_{i,Fr} = \sum_{j \neq i} \zeta_{ij} x_j (\mathbf{u}_{R,i} - \mathbf{u}_{R,j})$$

↑                    ↑                    ↑  
摩擦力            摩擦系数    j 组分相对于溶液的速度

# 力平衡

- 驱动力等于相互作用力

$$-RT \frac{1}{x_i} \nabla x_i - \sum_{j \neq i} \zeta_{ij} x_j (\mathbf{u}_{R,i} - \mathbf{u}_{R,j}) = 0$$

# 多组分传递方程组

- 相对于溶液速度的摩尔通量

$$\mathbf{j}_i = c x_i \mathbf{u}_{R,i}$$

- 与 Maxwell-Stefan 扩散系数

$$D_{ij} = \frac{1}{RT \zeta_{ij}}$$

- 给出 Maxwell-Stefan 方程组

$$-RT \frac{1}{x_i} \nabla x_i = \sum_{j \neq i} \frac{1}{D_{ij}} (x_j \mathbf{j}_i - x_i \mathbf{j}_j)$$

# 溶液具有速度吗？

- 所有组分基于溶液的相对速度加和为 0
- 溶液速度

$$\mathbf{u} = \frac{\sum \rho_i \mathbf{u}_i}{\sum \rho_i}$$

# 物质守恒方程

- 除了其中一个组分外的每个组分

$$\frac{\partial cx_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{j}_i + cx_i \mathbf{u}) - \nu_A r = 0 \quad -RT \frac{1}{x_i} \nabla x_i = \sum_{j \neq i} \frac{1}{D_{ij}} (x_j \mathbf{j}_i - x_i \mathbf{j}_j)$$

- 所有组分通量的加和得到连续性方程

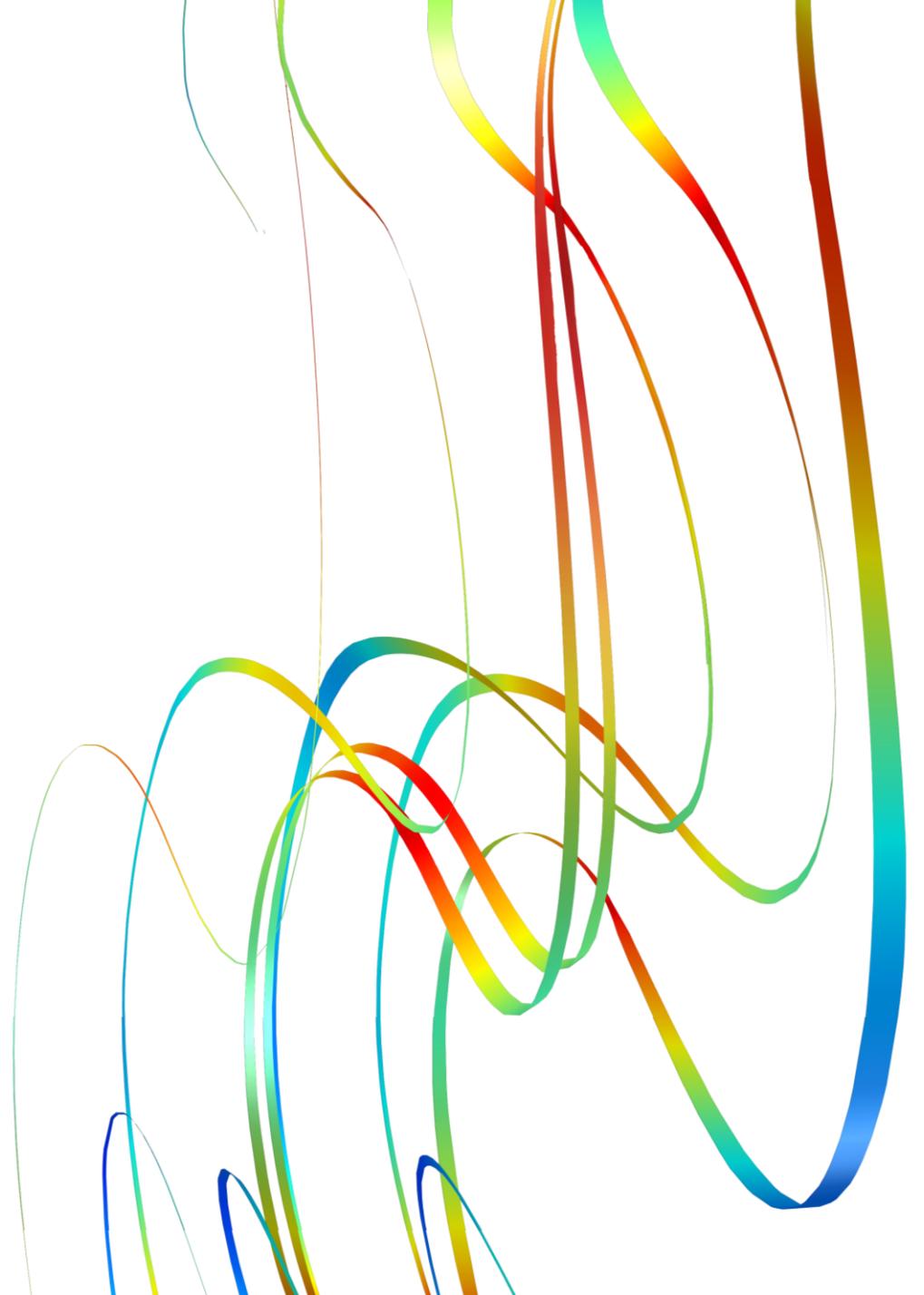
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

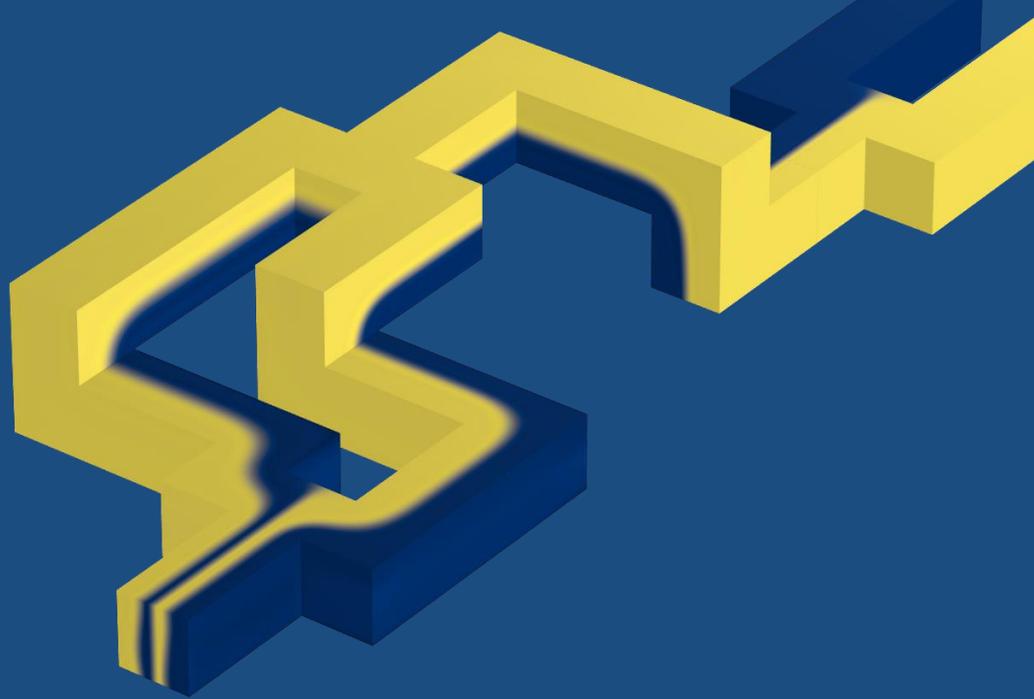
# 请联系我们

- 联系方式
  - [cn.comsol.com/contact](http://cn.comsol.com/contact)
  - [support@comsol.com](mailto:support@comsol.com)
- 电话
  - 上海：021-5077 6566
  - 北京：010-6811 8080
- 官方微信公众号
  - COMSOL-China



扫描二维码  
关注 COMSOL  
微信公众号



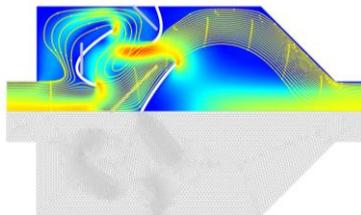


**微流体模块**

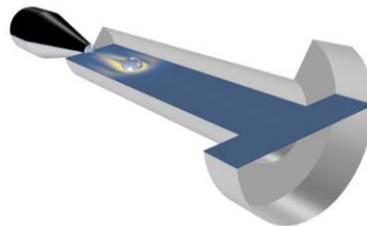
## 微流体模块

- 增强的单相流边界条件
- 两相流：水平集、相场，以及移动网格
- 三相流：相场
- 流固耦合（与结构力学或 MEMS 模块耦合）
- 电动力学：电渗、电泳
- 较稀薄气体流动：滑移流

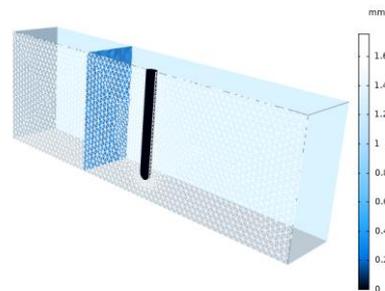
特斯拉微阀的形状优化。  
白壁= 优化后  
灰壁= 优化前



使用水平集方法两相流模拟的  
打印机微型喷嘴的墨滴



微型腔室中的两相流动流固耦合



# 微流体

- 微尺度下的流动
- 系统特征长度  $L$  的影响很大
- 表面参数控制体积状态

属性	长度尺度
体积	$L^3$
粘性力	$L^2$
惯性力	$L^3$
Laplace 压力	$1/L$
毛细力	$1/L$
渗透性 (多孔介质)	$L^2$
扩散时间尺度	$L^2$
电场	$1/L$
Knudsen 数	$1/L$

少量流体 / 较小系统尺寸 / 较快的处理

层流或蠕动流

两相流中表面张力起主要作用

达西定律 - 摩擦主导的流动

扩散缓慢

电动力学效应

稀薄效应

# 微流动过程

- 压力驱动流动 (Re) : 层流或蠕动流, 滑移/无滑移壁, 移动壁和渗漏壁
- 物质传递与反应 ( $Pe_{MT}$ ) : 分散、混合与分离、过滤、表面反应、混沌对流、电动力学
- 表面张力与两相流 (Ca, We) : 自由表面变形、喷射与液滴、液滴动力学、移动接触
- 传热 ( $Pe_{HT}$ , Mg) : 传热、反应热、相变、蒸发、冷凝、马兰戈尼现象

**雷诺数 (Re) :**

惯性力/粘性力

$$Re = \frac{U_0 L_0}{\nu}$$

**佩克莱数 (Pe) :**

对流速率/扩散速率

$$Pe_{MT} = \frac{U_0 L_0}{D} \quad Pe_{HT} = \frac{\rho c_p U_0 L_0}{\kappa}$$

**毛细管数 (Ca) :**

粘性力/表面张力

$$Ca = \frac{\mu U_0}{\gamma}$$

**韦伯数 (We) :**

流体惯性/表面张力

$$We = \frac{\rho U_0^2 L}{\gamma}$$

**马兰戈尼数 (Mg) :**

热表面张力/粘性力

$$Mg = \frac{d\gamma}{dT} \frac{L\Delta T}{\mu\alpha}$$

# 关键应用领域：片上实验室

微流体平台 / 片上实验室

毛细管驱动

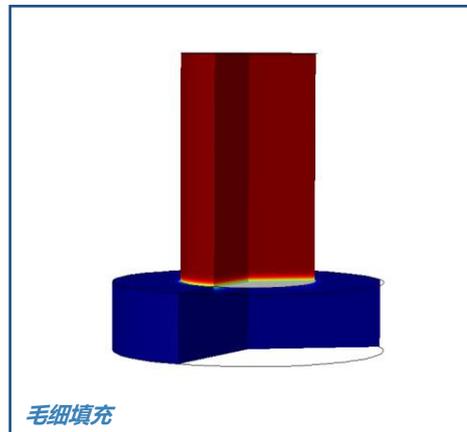
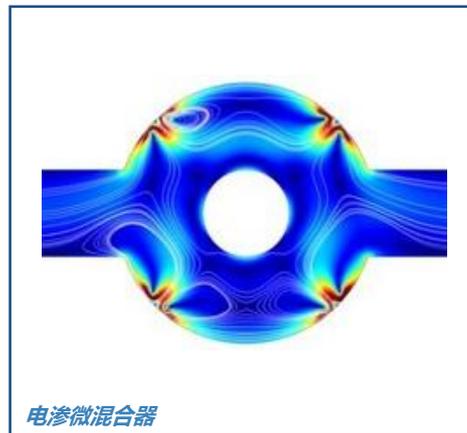
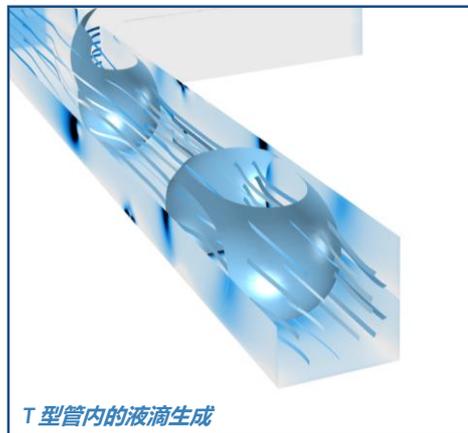
基于液滴

压力驱动

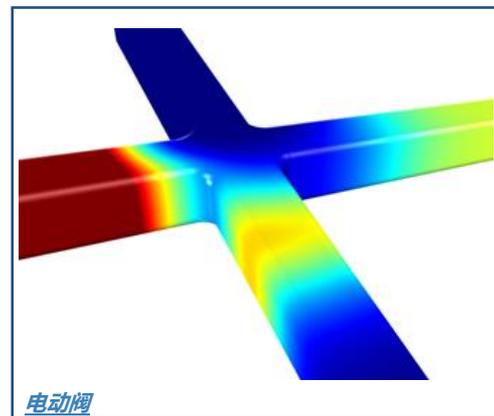
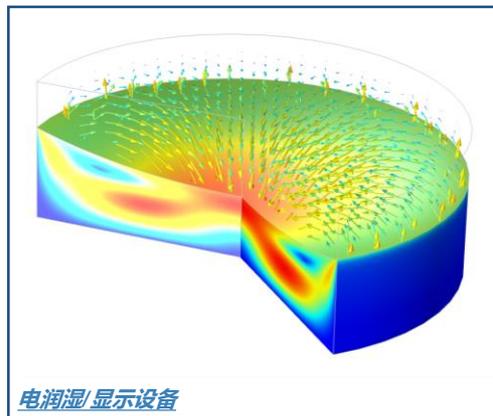
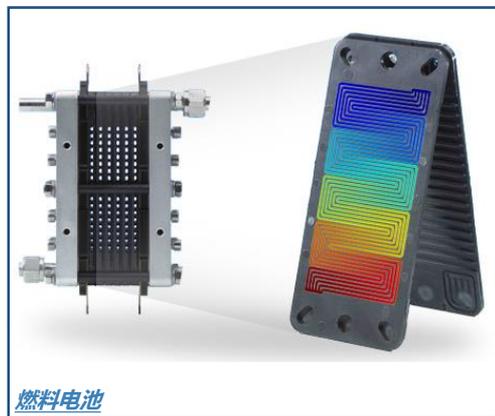
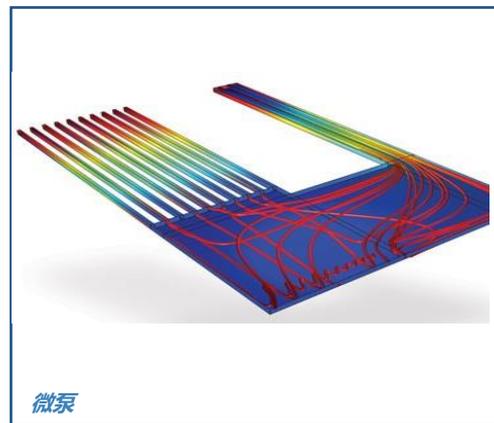
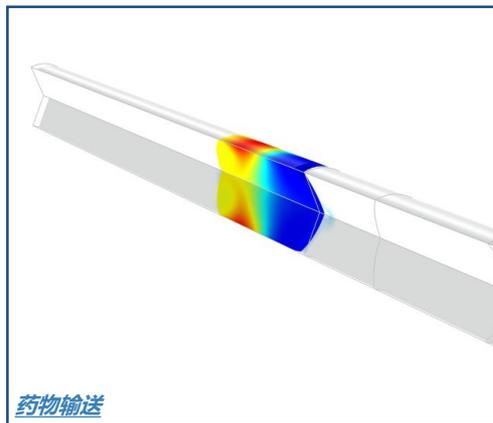
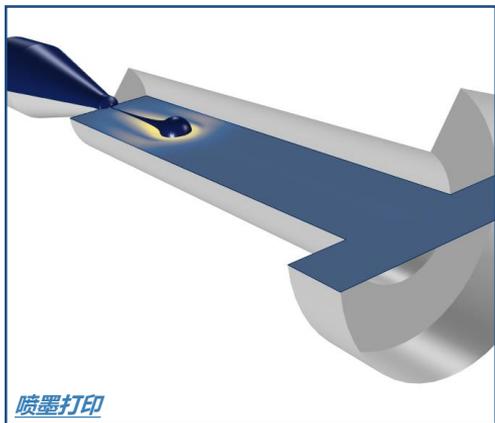
电动力

磁动力

离心



# 其他应用领域

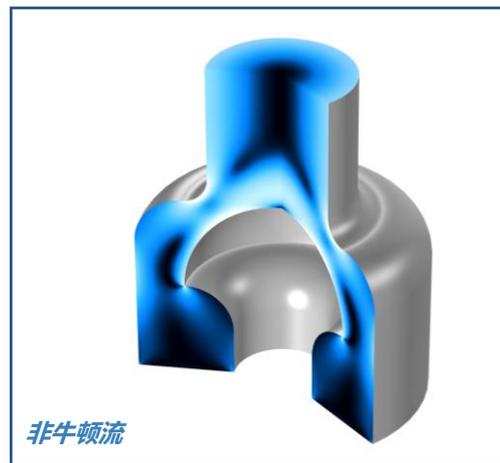
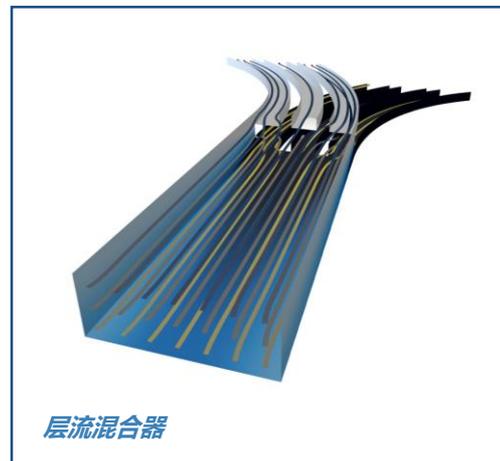


# COMSOL 的功能

微流体模块可以解决的问题

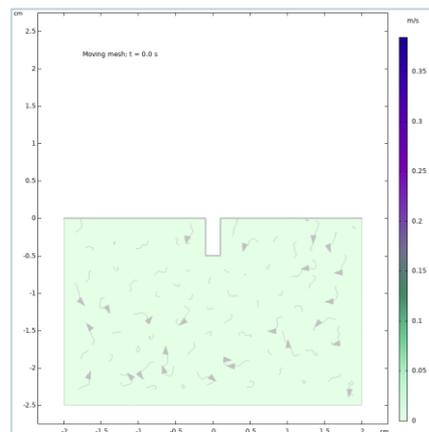
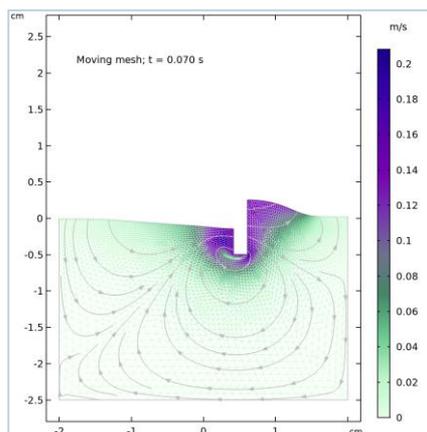
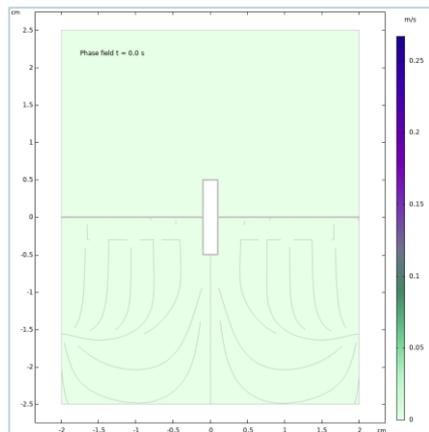
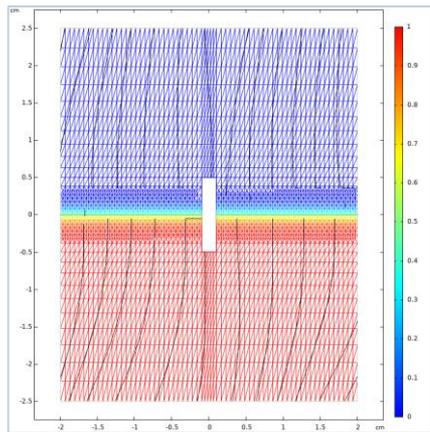
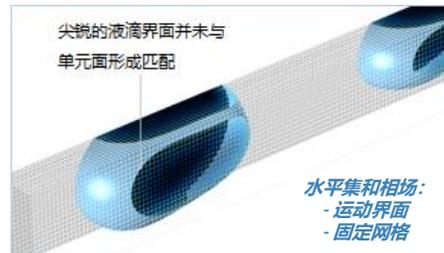
# 单向流

- 层流 ( $Re \lesssim 1000$ )
- 蠕动流 ( $Re \ll 1$ )
- 不可压缩流
- 可压缩流 ( $Ma < 0.3$ )
- 浅槽近似
- 非牛顿流体：
  - 幂律定律： $\mu = m\dot{\gamma}^{n-1}$
  - Carreau 模型： $\mu = \mu_{\infty} + (\mu_0 - \mu_{\text{inf}})[1 + (\lambda\dot{\gamma})^2]^{\frac{(n-1)}{2}}$
  - 用户定义：
    - 查找表或者数学表达式
    - 依赖于任意物理变量：例如剪切速率、温度



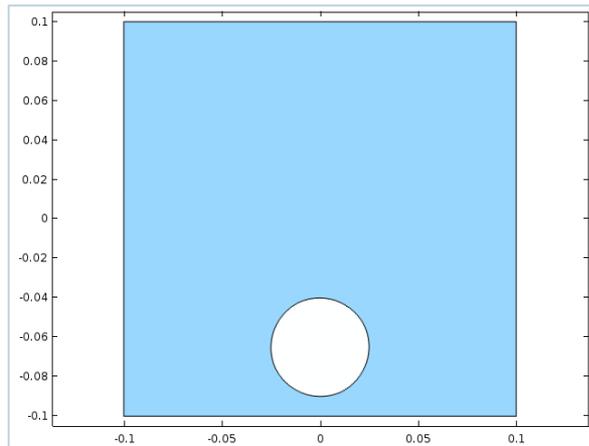
# 两相流

- 三种主要方法
  - 水平集：固定网格
  - 相场：固定网格
  - 动网格



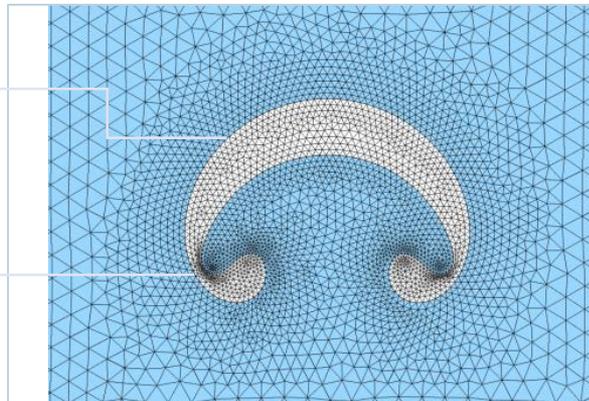
# 两相流：动网格

- 在动网格中求解问题
- 相界面尖锐，描述为初始几何的边界
  - 对网格解析度不敏感，因为单元的边沿着相界面边界形状分布
  - 相界面的两侧可以添加不同的物理场
  - 可以在两相之间应用边界条件
- 网格必须连续地变形
  - 不能求解涉及拓扑变化的问题



网格沿相边界分布

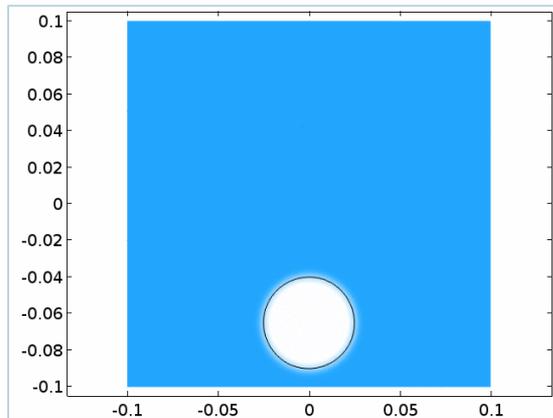
当这里颈缩时会改变拓扑



# 两相流：水平集和相场接口

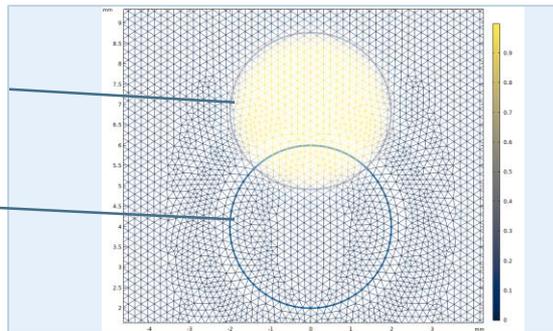
- 在固定网格上求解问题
  - 自然的拓扑变化
  - 对网格分辨率敏感
- 水平集/相场方程
  - 第一相中取小值 (LS:0 PF:-1) , 另一相取大值 (LS/PF:1)
  - 密度、粘度等材料属性也相应进行缩放
  - 相界面可以看作扩散, 取这些界面因子的中心值 (LS:0.5 PF:0)
- 水平集
  - 一个额外的方程
  - 当表面张力相对低于压力时更有效
- 相场
  - 两个额外的方程
  - 数值稳定性更好, 表面张力作用明显时更精确

自然发生拓扑变化



$t > 0$  之后的气泡位置, 网格不变

气泡初始位置



# 三相流

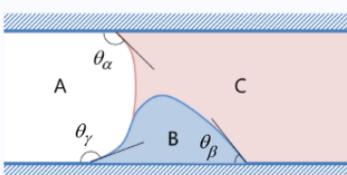
- 使用相场方法的预定义接口
- 考虑液体密度和粘度的不同，并且包含表面张力的效应

▼ 润湿壁

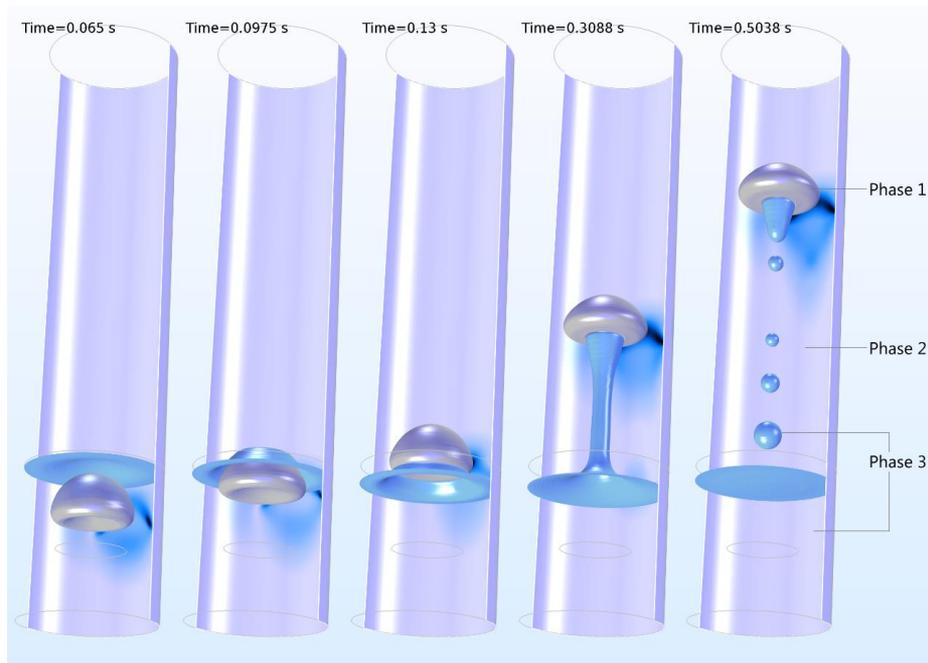
相 A 和 C 界面接触角:  
 $\theta_\alpha$   rad

相 B 和 C 界面接触角:  
 $\theta_\beta$   rad

相 A 和 B 界面接触角:  
 $\theta_\gamma$   rad



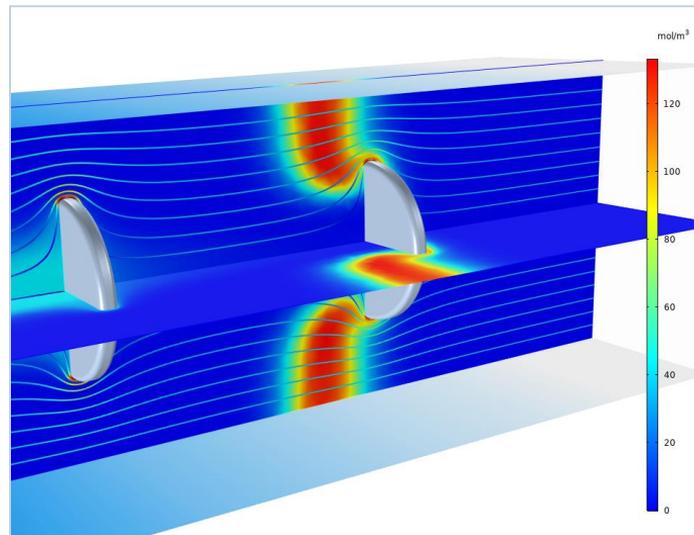
接触角和表面张力



三相流教程模型

# 多孔介质流

- 达西定律
  - 黏性占主导的流动
  - 仅用于不可压缩流动
- 布林克曼方程
  - 考虑流体惯性力，使用 Stokes-Brinkman 选项可以忽略惯性力
  - 可压缩/不可压缩流动
  - 可以添加体积力
- 自由与多孔介质流动
  - 预定义布林克曼方程与层流的耦合接口



溶质在一个微型电池内的多孔介质中的压力驱动和电泳传递

# 稀薄流

- 稀薄度由克努森数 (Knudsen) 描述

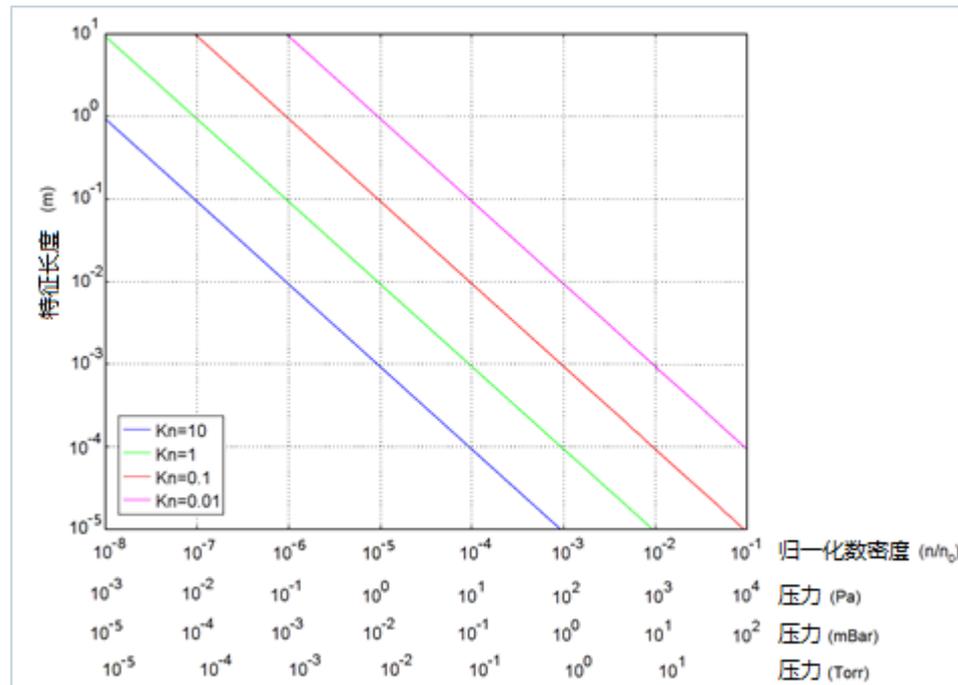
$$Kn = \frac{\lambda}{L}$$

稀薄流接口:

$0.01 < Kn < 0.1$ : 滑移流

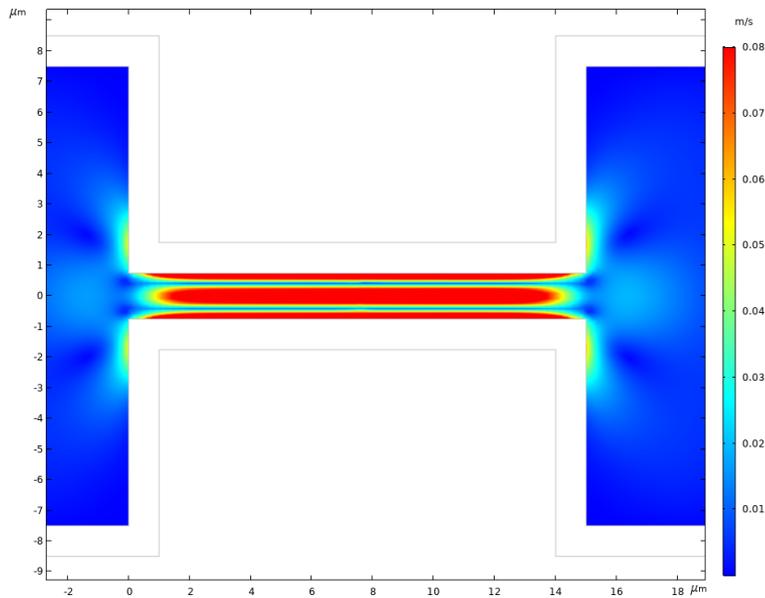
$0.1 < Kn < 10$ : 过渡流

$Kn > 10$ : 分子流



# 滑移流

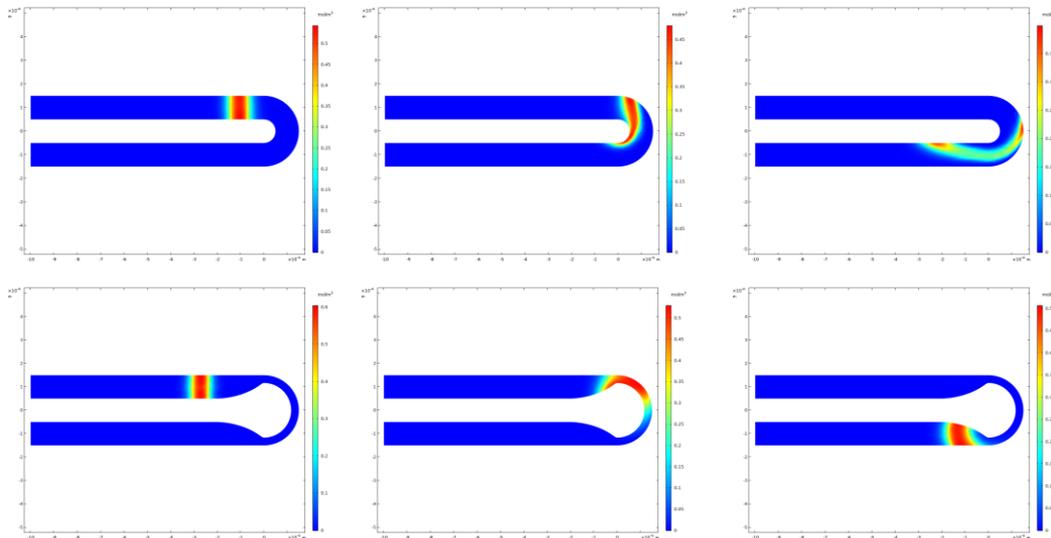
- 除Knudsen层外，Navier-Stokes 方程仍然适用
- COMSOL 的滑移流接口可以模拟滑移流范围内的层流、等温流或热流
- 可以使用滑移边界条件和温度跳变模拟Knudsen层
- 滑移的定义方法有两种
  - 通过 Maxwell 模型及任意的调节系数
  - 直接定义粘性系数、热滑移系数与温度跳变系数



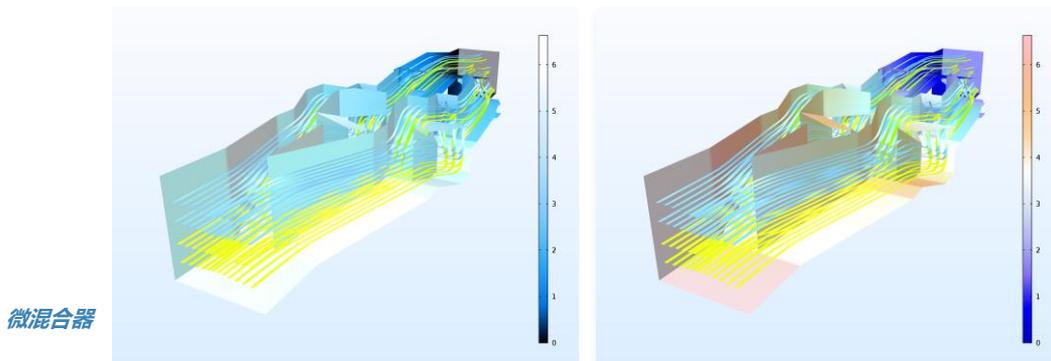
滑移流验证教程模型

# 物质传递

- 增强了稀物质传递接口的功能
  - 多组分扩散、对流与迁移
- 耦合化学反应工程模块
  - 浓物质传递
  - 化学反应：本体 / 表面
  - 反应工程接口



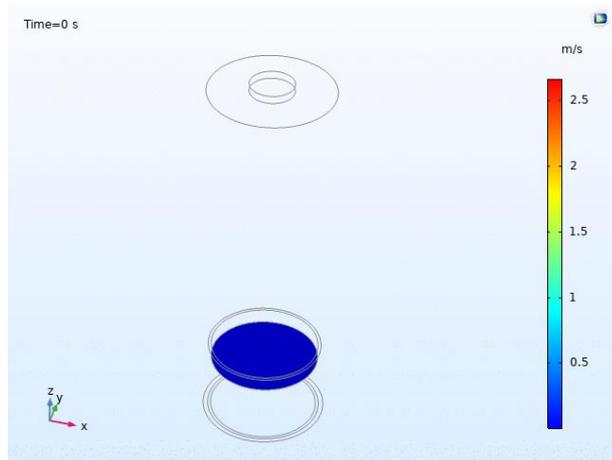
可以最小化分散的微型U弯通道优化设计



微混合器

# 电/磁流体力学

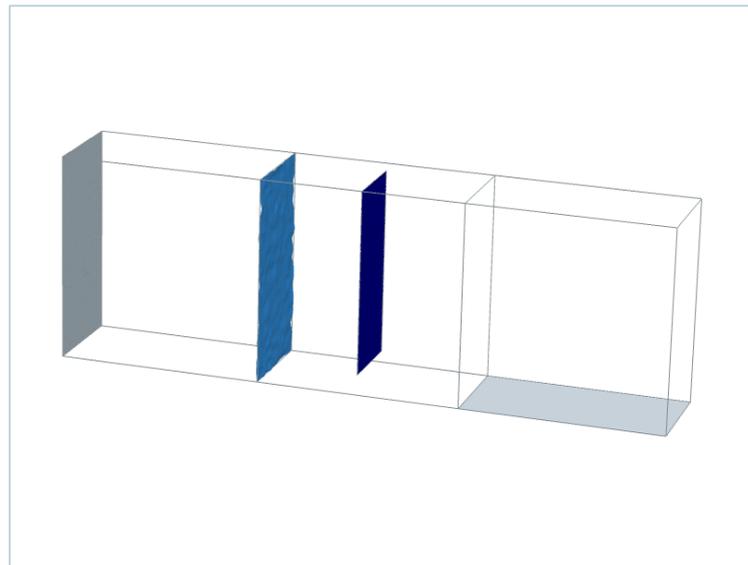
- 电润湿
- 电渗
  - 在小长度尺度上显式地模拟双电层现象
  - 在较大尺度的模型上，电渗迁移可以描述为滑移边界条件
- 电泳
- 介电泳
- 磁泳（需要 AC/DC 模块）
- 电热流动



泰勒锥

# 流固耦合

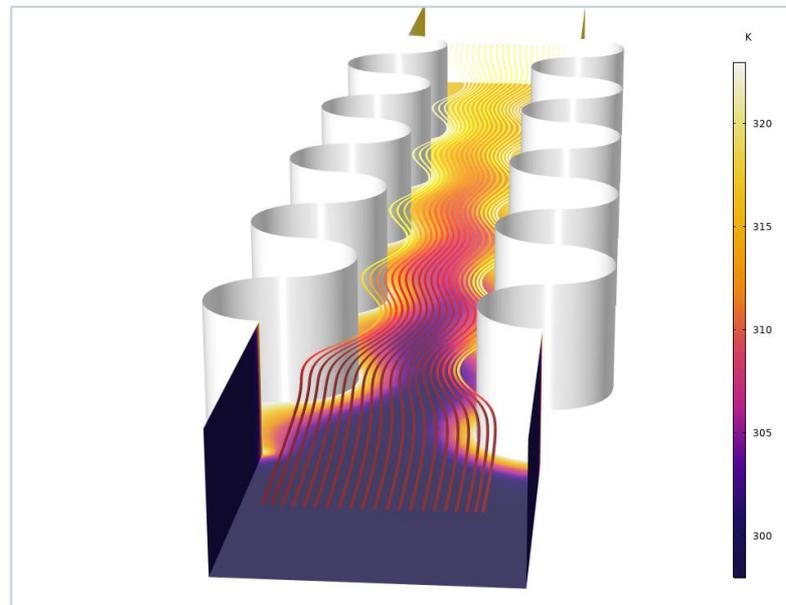
- 基于 ALE 动网格技术
- 流体与结构之间的双向全耦合
  - 作用在结构上的粘性力、压力与惯性流体力
  - 传递到流体的动量
- 小形变与大形变
- 高度精确的流体载荷计算
- 预置物理场接口能够更容易、更迅速地建立模型——无需手动设置求解器
- 自动设置分离式求解器处理大尺度三维模型的稳态、参数化计算



微型腔室中的流-固和两相流耦合建模

# 热流

- 非等温流
- 自然对流与强制对流
- 传导
- 辐射 (需要传热模块)
- 焦耳热
- 热泳
- 马兰戈尼流动

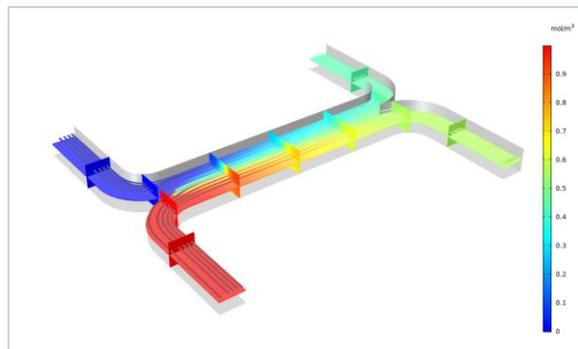
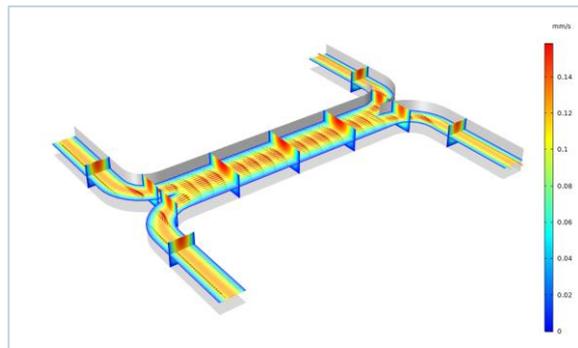


微换热器中的温度场和流场

# 应用案例

# 简介模型：可控微型扩散混合器

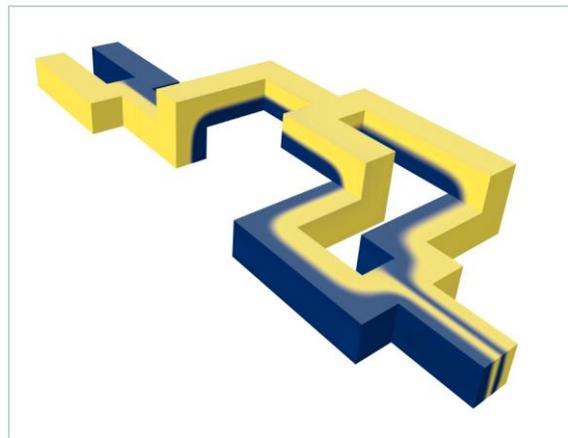
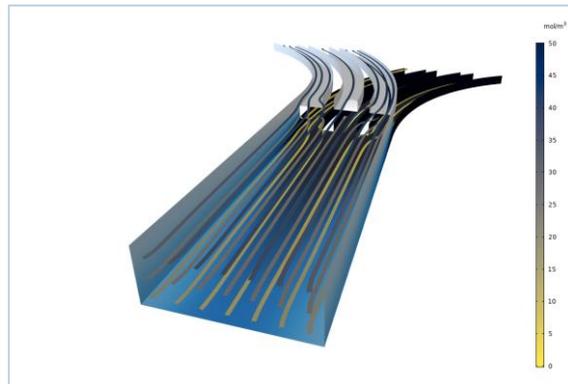
- 介绍了微流体建模方法
- 展示如何建立流体流动模型
  - 蠕动流
  - 物质传递
  - 层流流入边界条件
- 显示如何进行后处理
  - 创建派生值数据集，例如利用 COMSOL 自动生成的数据集绘制切平面
  - 计算派生量的数值解，例如平均出口浓度
  - 三维、二维和一维绘图组



可控扩散微混合器

# 其它混合器模型—增强混合

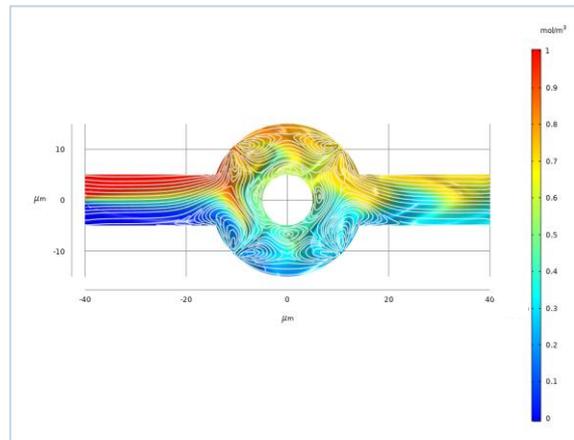
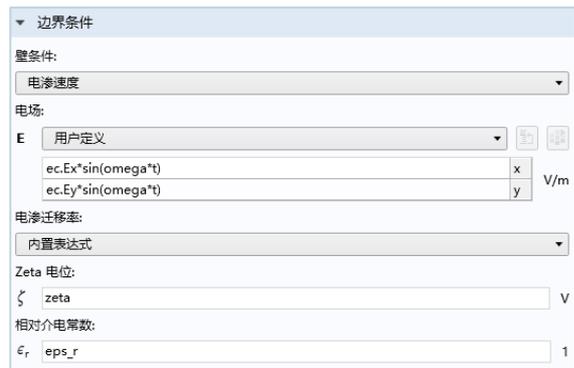
- 关键特征
  - 导入行业标准 CAD 几何模型
  - 动网格，旋转框架
  - 移动/旋转零件
  - 浓物质或稀物质对流与扩散
  - 混合指数计算
  - 可以添加非线性因素与更多物理场：传热、化学、电场或磁场 ...



分离重组混合器基准模型

# 电渗泵

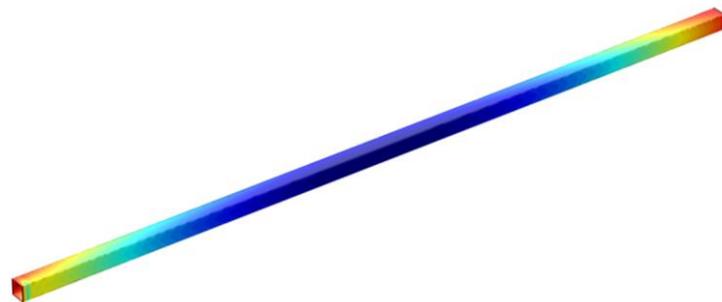
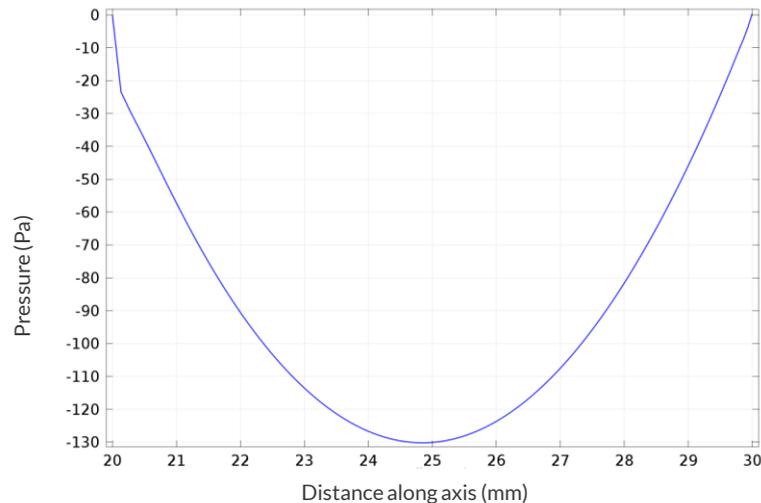
- 微流体片上实验设备的重要组件
- 没有运动零件
- 易集成于微流道回路
- 关键特征
  - 流场：动量平衡、Stokes 或 Navier-Stokes
  - 电场：电流平衡
  - 内置边界条件



电渗混合器

## 旋转流道

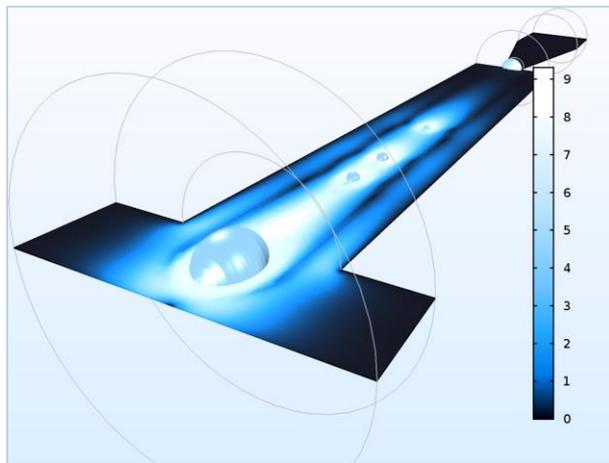
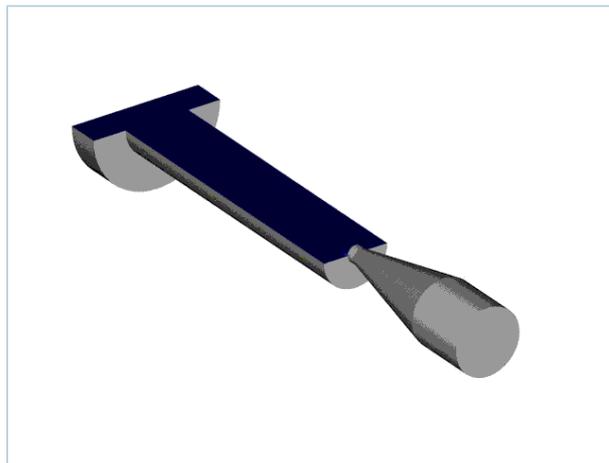
- 流体流动基准模型计算了旋转流道轴向的压力
- 显示如何设置离心力和向心力
- COMSOL 与相关论文中的结果相一致



T. Glatzel et al., *Computational fluid dynamics (CFD) software tools for microfluidic applications - A case study*, *Computers & Fluids*, vol. 37, pp. 218235, 2008.

# 喷墨打印

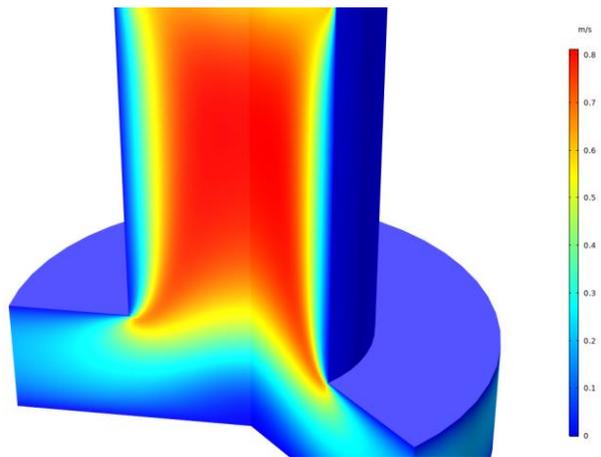
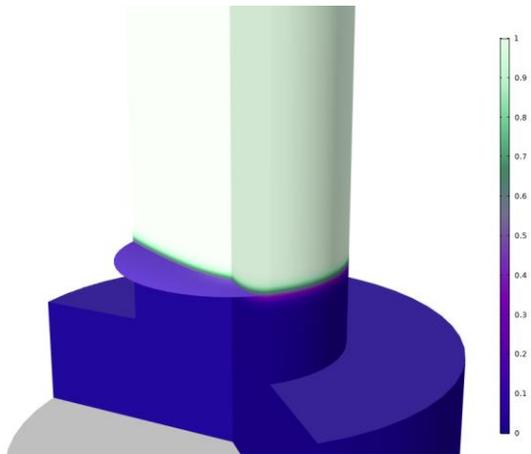
- 微流体技术
  - 将液滴喷射到纸面上
  - 压电或热源产生压力振荡
- 关键特征
  - 精确的界面追踪；可以计算界面法向、曲率与物理量
  - 使用重新初始化得到较好的质量守恒
  - 映射网格
  - 多物理场耦合：静电场、传热...



# 毛细填充

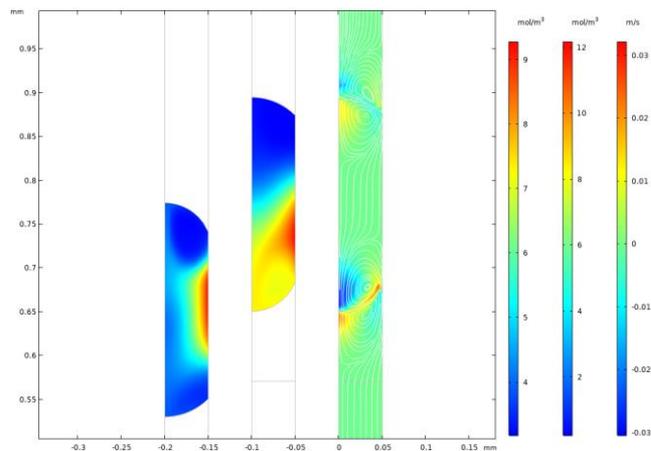
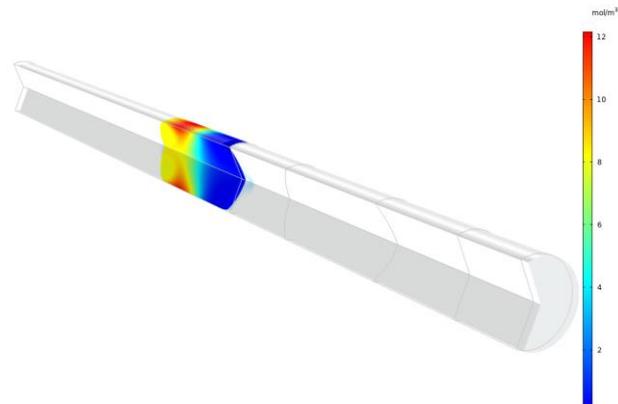
## ▪ 关键特征

- 毛细驱动两相流
- 表面张力与壁附着力
- 内置移动接触：相界面沿壁面移动，亲水或疏水
- 使用壁迁移长度和接触角定义摩擦力
- 润湿性梯度：热梯度（内置），电润湿，光电润湿



# 药物输送

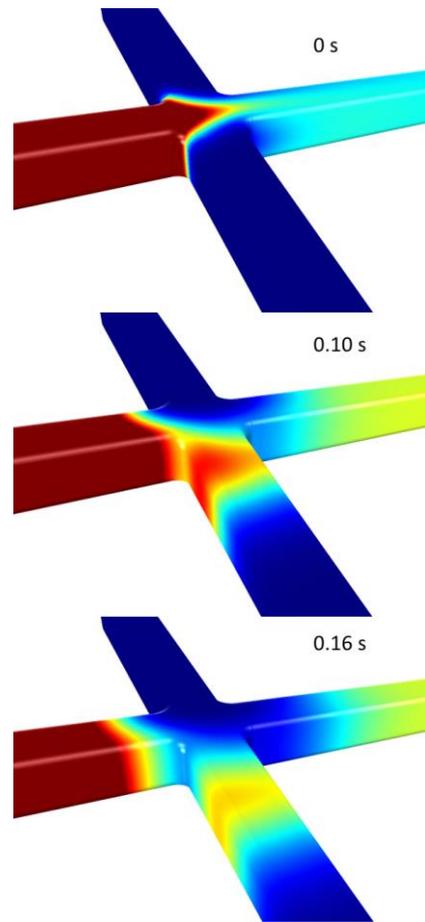
- 药物输送系统维持水溶性药物的浓度分布
- 恒定体积的水滴沿着毛细管以恒定速度运动
- 毛细管壁包含一个渗透薄膜，当液滴穿过薄膜时，接触角发生变化，并且药物溶解到水中
- 利用稀物质传递、层流两相流和动网格进行模拟



# 电动阀中的质量传递

## ▪ 关键特征

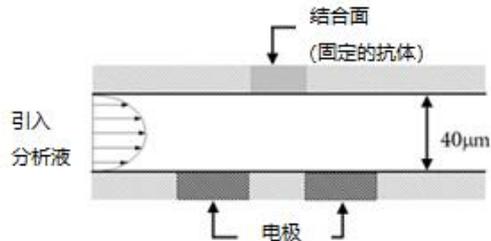
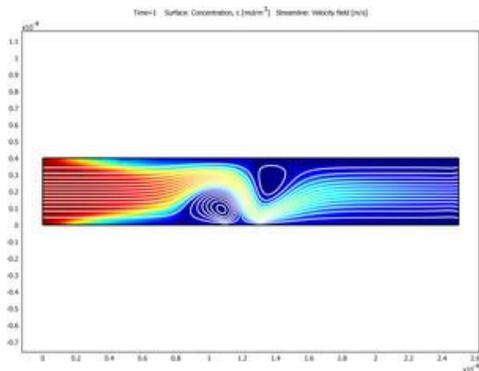
- 流场：动量平衡、Stokes 或 Navier-Stokes
- 电场：电流平衡
- 质量传递：稀物质、Nernst-Planck
- 电荷数、迁移率、扩散率、非线性材料属性



# 交流电增强表面反应

## ■ 关键特征

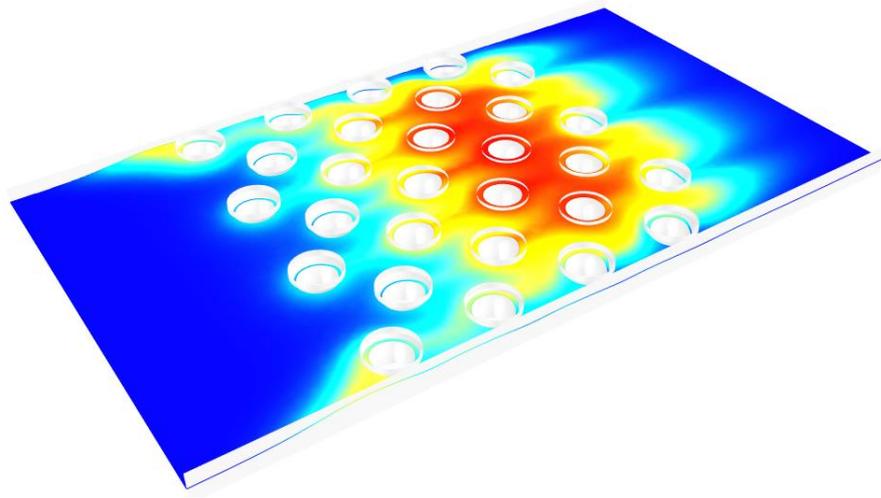
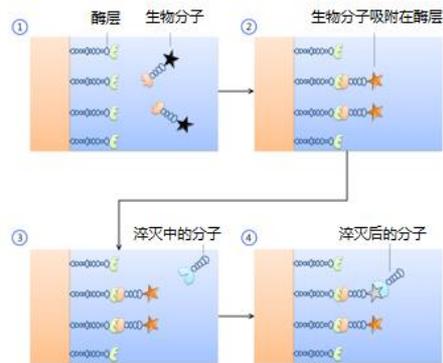
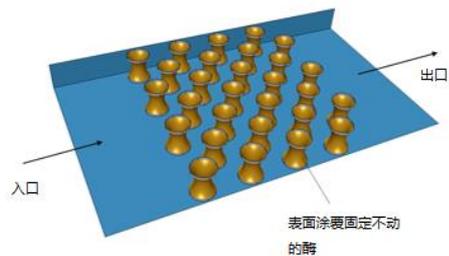
- 静电场、焦耳热、含表面反应的物质传递与层流耦合
- 非均匀焦耳热源产生的温度梯度引起电热力
- 流体中的漩涡增强了分析物传递到表面反应



Model courtesy of Gaurav Soni, Marin Sigurdson, and Carl Meinhart of the Department of Mechanical and Environmental Engineering, University of California, Santa Barbara.

# 生物传感器表面反应

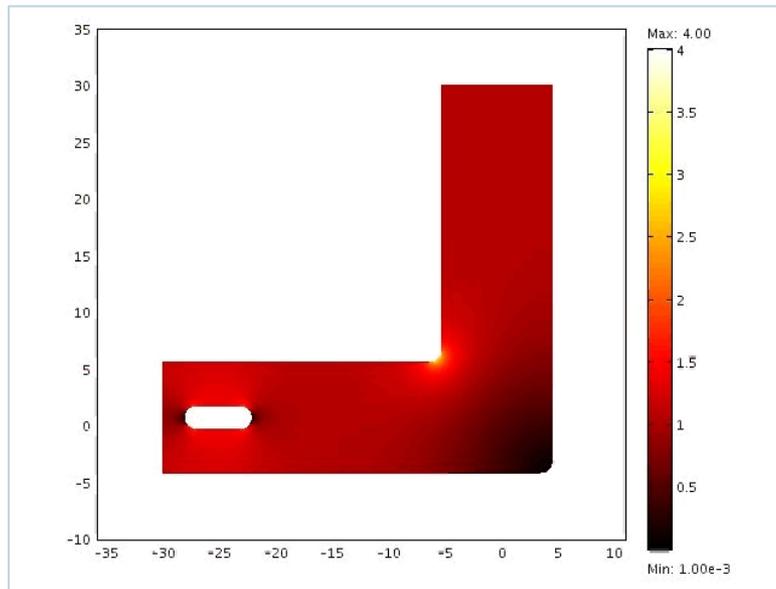
- 生物传感器的每个流体单元均包括一系列微柱阵列，表面涂覆活性酶
- 微柱引起了被动混合
- 化学物质的吸附产生信号
- 表面反应耦合流体质量传递



# 电泳

## ■ 关键特征

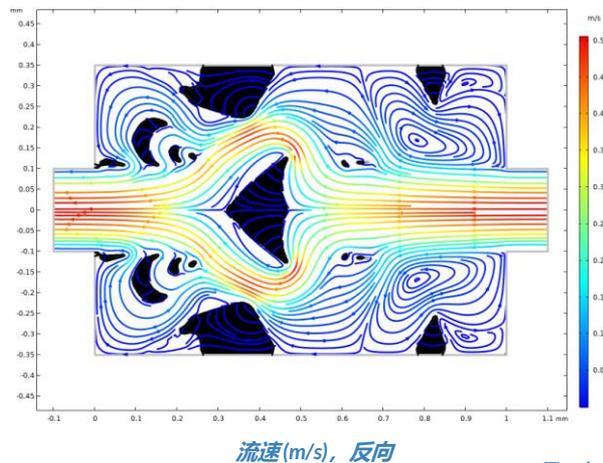
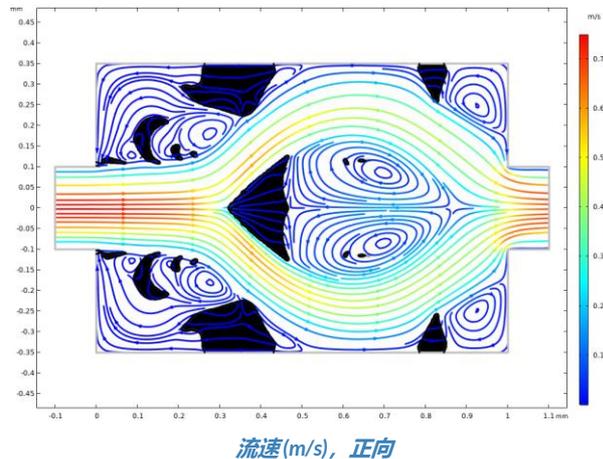
- 毛细驱动两相流
- 表面张力与壁附着力
- 内置移动接触：相界面沿壁面移动，亲水或疏水
- 使用壁迁移长度和接触角定义摩擦力
- 润湿梯度：热梯度（内置），电润湿，光电润湿



Model courtesy of Davison and Sharp,  
COMSOL 2006 Conference

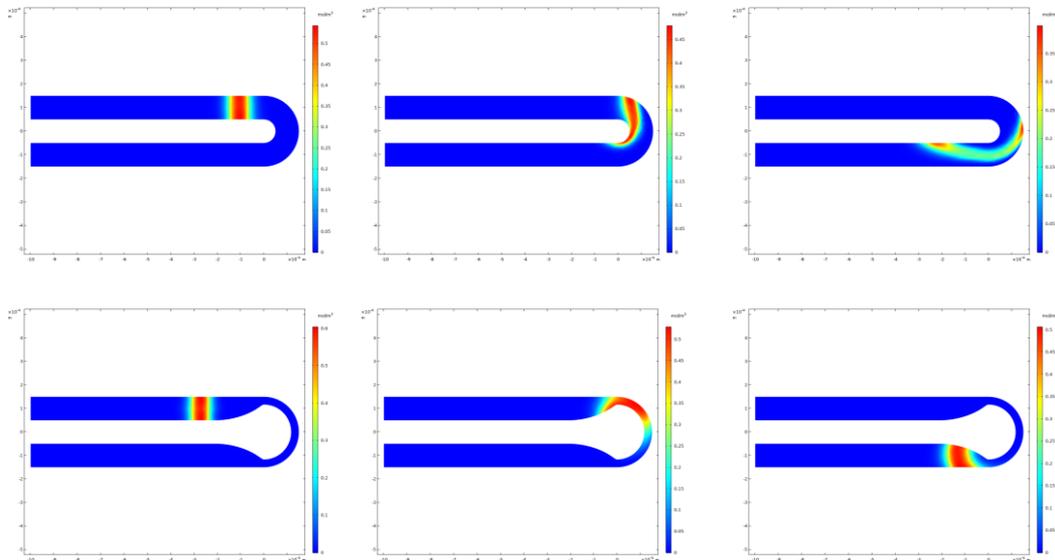
# Tesla 微阀结构优化

- Tesla 微阀的结构优化，充分抑制回流
- 优化模型使正向流与反向流摩擦损耗比最小
- 阀两端正向流的压降大约为 200 Pa，反向流的大约是 380 Pa
- 反向流中相同压降的流动小 40%

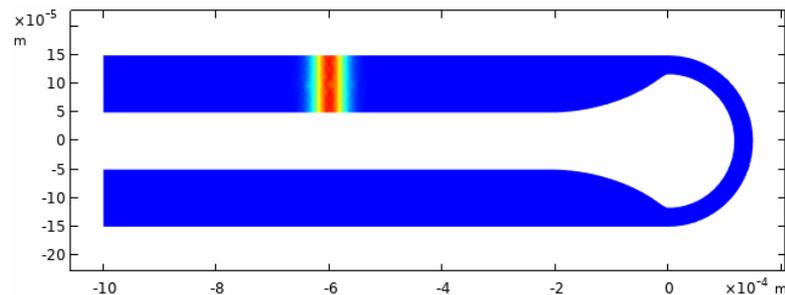


## 微流道优化

- 模型优化了弯曲微管的形状，提升下游化学物质检测器的性能
- 管道形状通过一组包含 5 个参数的 Bezier 曲线绘制
- 模型计算这些参数的值以使沿着内、外管壁流动的流体到达检测器所需时间差最小
- 无梯度优化求解器
  - Bound Optimization by Quadratic approximation (BOBYQA)



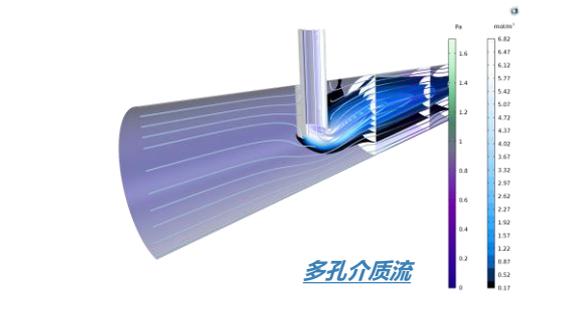
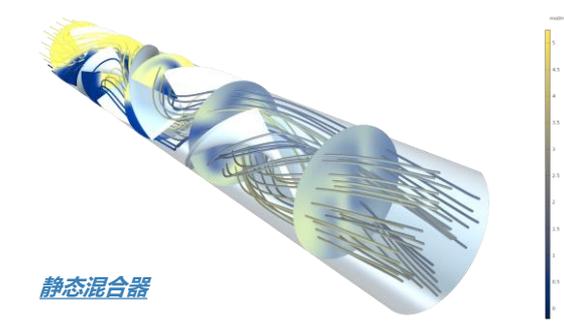
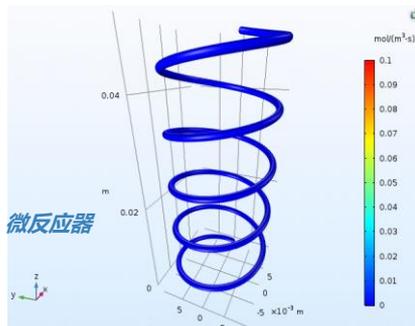
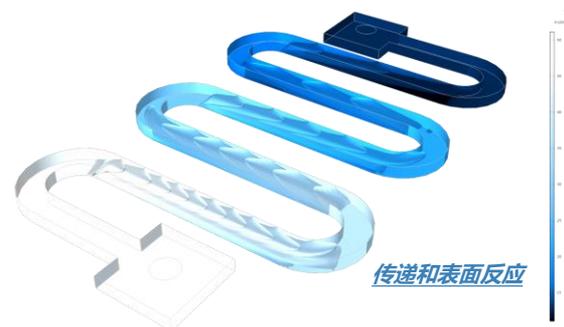
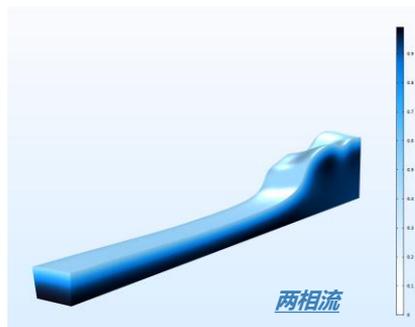
在电泳流动驱动下，中性物质分布带到达微通道的弯曲部位。在未经过优化设计的通道中，分布带被发散（上），经过优化之后，分布带保持不变（下）。



优化通过弯曲微通道的电渗流的带分散

# 总结：微流体模块

- 单相牛顿/非牛顿流体流动
- 不混溶两相流
- 多孔介质流
- 化学物质传递
- 热流
- 稀薄气体流



# 请联系我们

- 联系方式

- [cn.comsol.com/contact](http://cn.comsol.com/contact)
- [support@comsol.com](mailto:support@comsol.com)

- 电话

- 上海: 021-5077 6566
- 北京: 010-6811 8060

- 官方微信公众号

- COMSOL-China



扫描二维码  
关注 COMSOL  
微信公众号

