Interní workshop VŠCHT

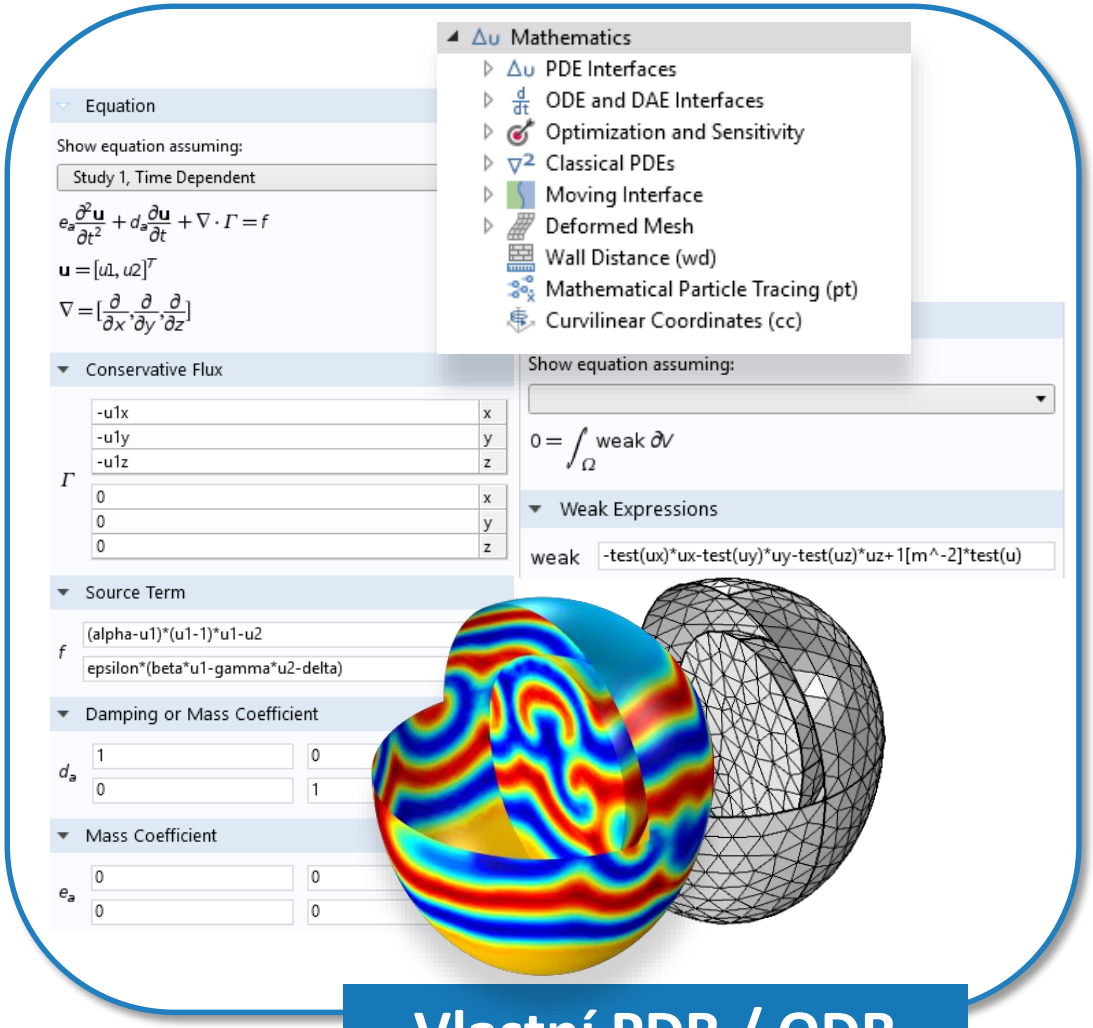
Martin Kožíšek, Matouš Lorenc

kozisek@humusoft.cz, lorenc@humusoft.cz

+420 284 011 745, +420 284 011 749

© Copyright 2016 COMSOL. Any of the images, text, and equations here may be copied and modified for your own internal use. All trademarks are the property of their respective owners. See www.comsol.com/trademarks.

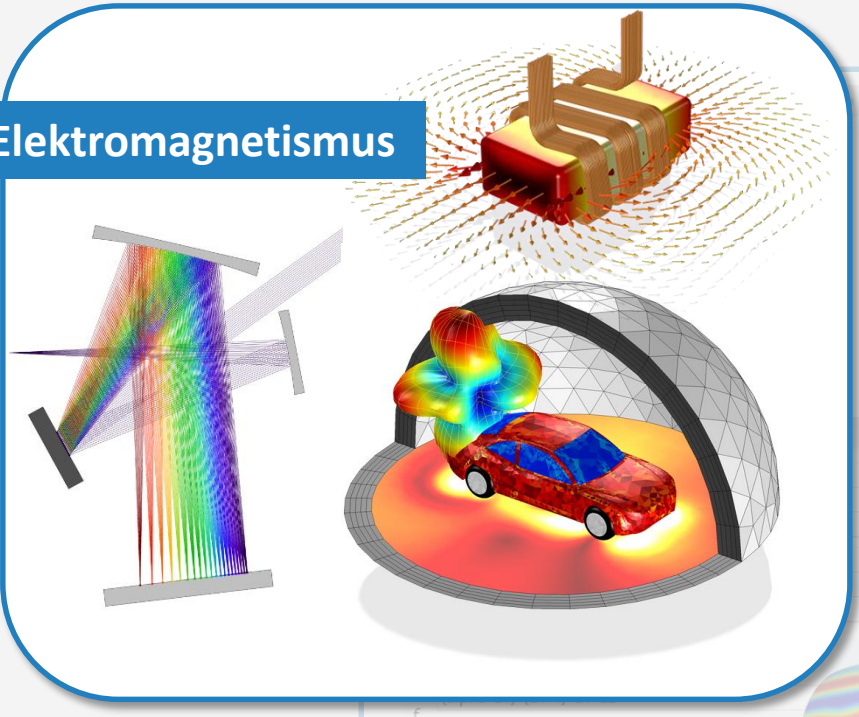
COMSOL



Vlastní PDR / ODR

COMSOL

Elektromagnetismus



Mathematics

- PDE Interfaces
- ODE and DAE Interfaces
- Optimization and Sensitivity
- Classical PDEs
- Moving Interface
- Deformed Mesh
- Wall Distance (wd)
- Mathematical Particle Tracing (pt)
- Curvilinear Coordinates (cc)

Show equation assuming:

$$0 = \int_{\Omega} \text{weak}\, \partial V$$

Weak Expressions

weak: -test(ux)*ux-test(uy)*uy-test(uz)*uz+1[m^-2]*test(u)

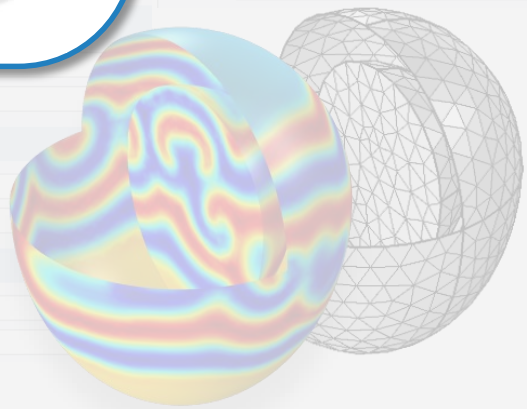
epsilon*(beta*u1-gamma*u2-delta)

Damping or Mass Coefficient

d_a: 1, 0, 0, 1

Mass Coefficient

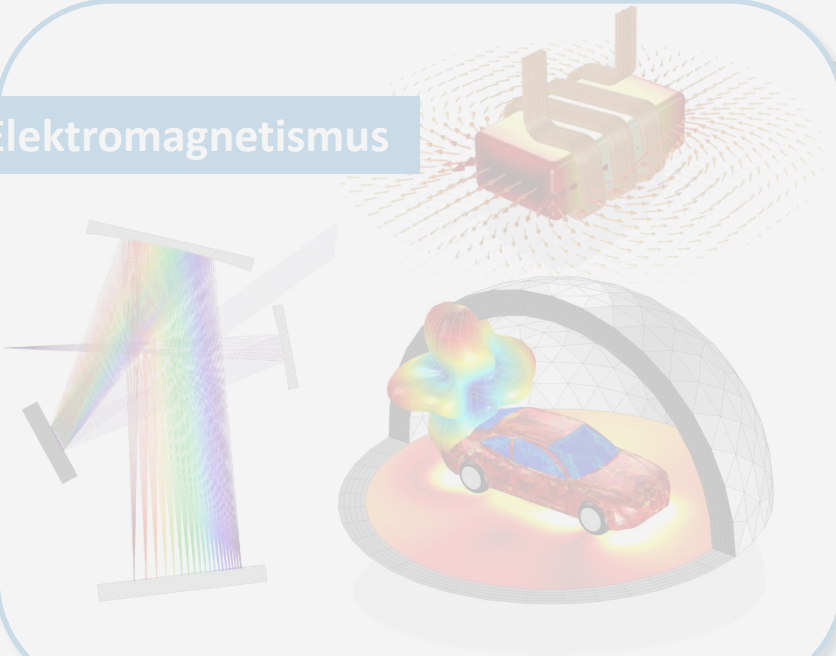
e_a: 0, 0, 0, 0

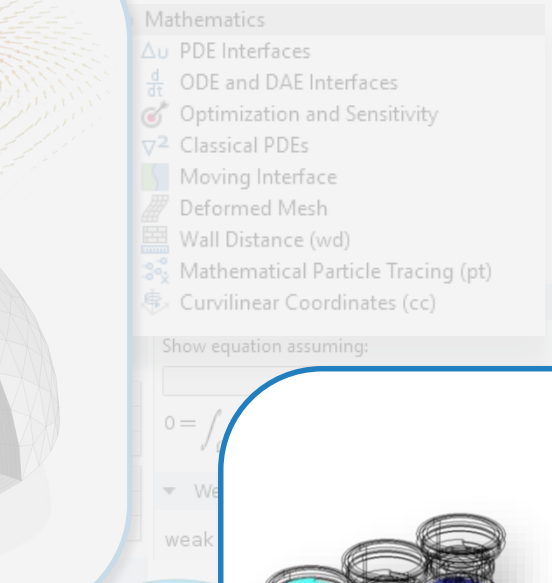


Vlastní PDR / ODR

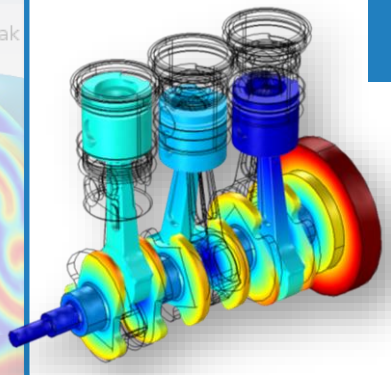
COMSOL

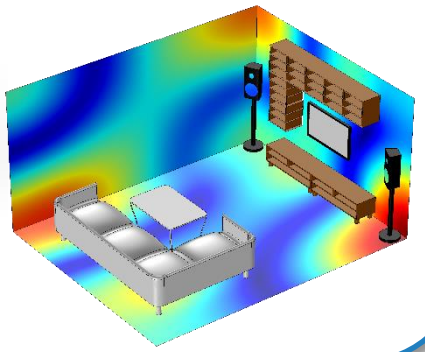
Elektromagnetismus





Strukturální Mechanika a Akustika

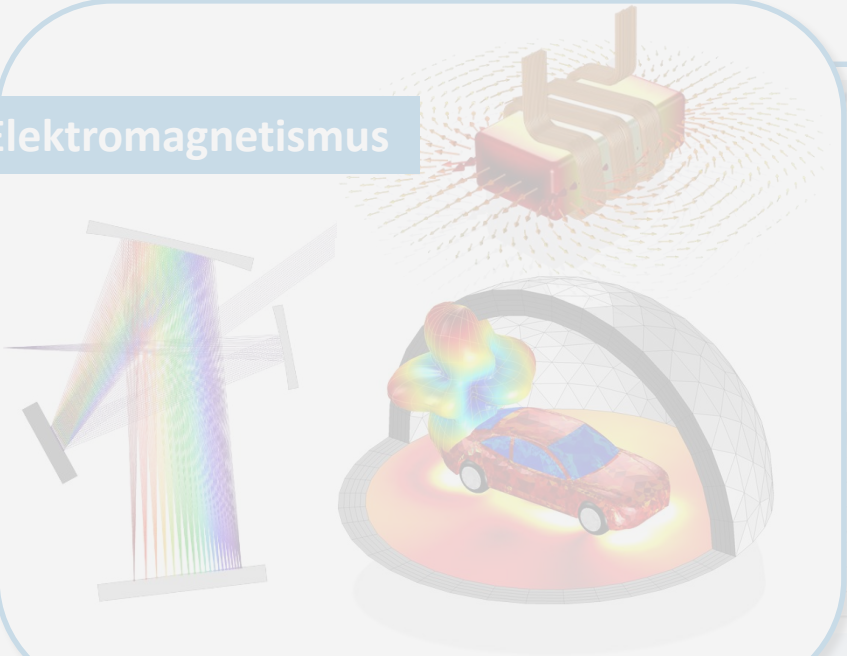




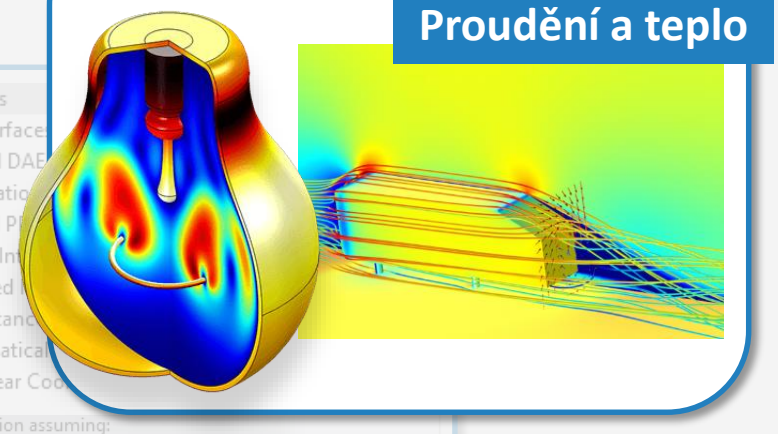
Vlastní PDR / ODR

COMSOL

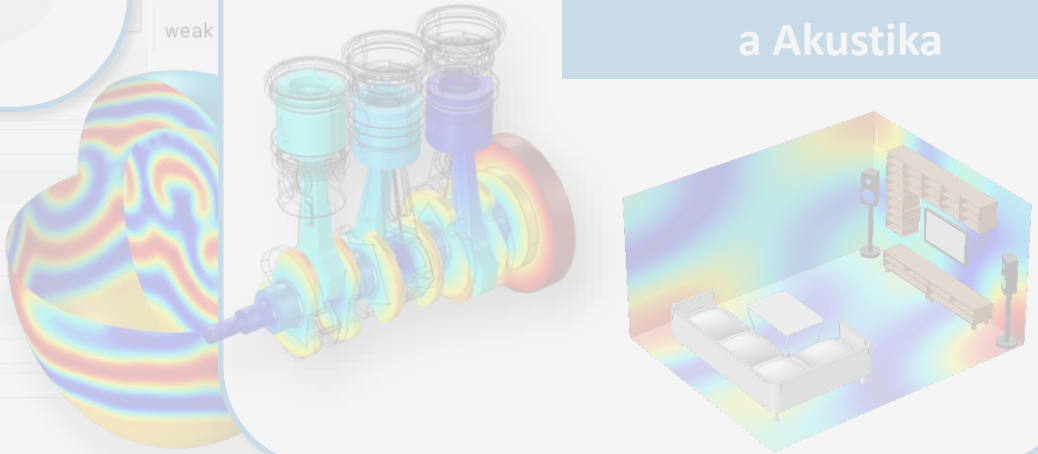
Elektromagnetismus



Proudění a teplo



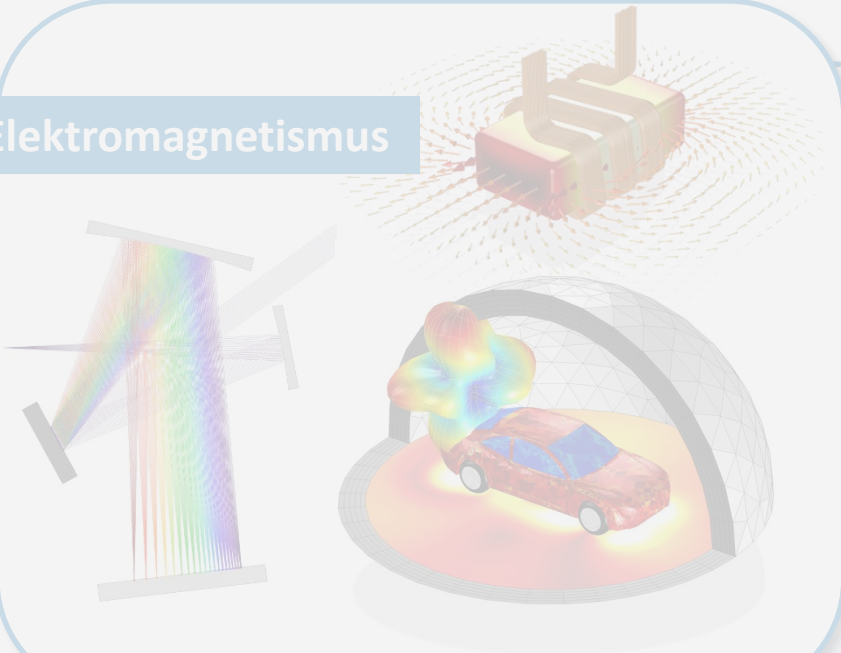
Strukturální Mechanika a Akustika



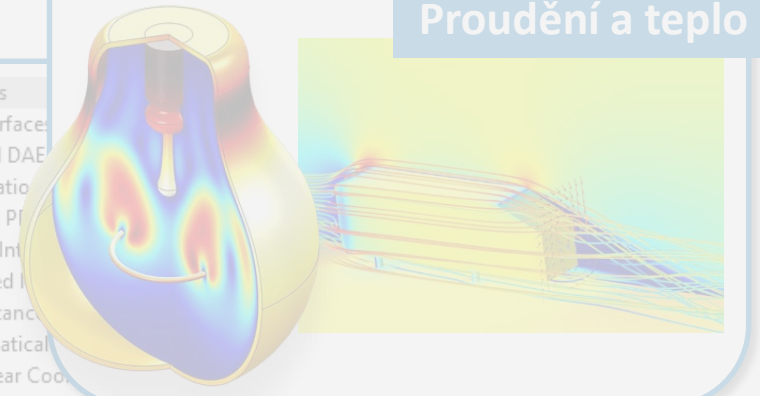
Vlastní PDR / ODR

COMSOL

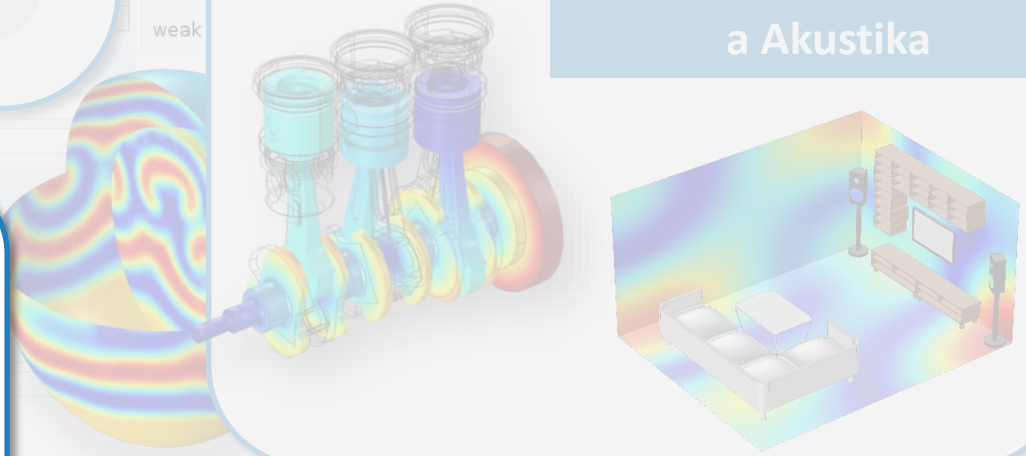
Elektromagnetismus



Proudění a teplo



Strukturální Mechanika a Akustika

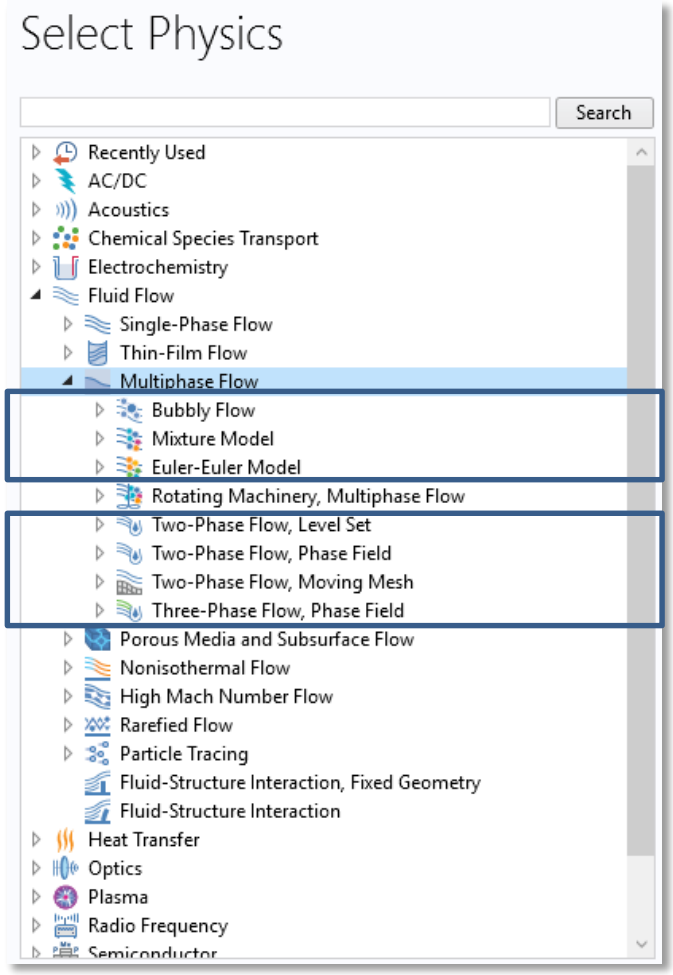


Chemie a elektrochemie

Vlastní PDR / ODR

COMSOL

Modelování vícefázového proudění



A

B

Nejjednodušší modely nezachycující fázové rozhraní:
bilance hmotnosti + Navier-Stokesovy rovnice
+ přídavná transportní rovnice pro příměs

Složitější modely simulující fázové rozhraní

COMSOL

A) Bubbly Flow + příklad

- Rovnice kontinuity
- Navier – Stokesovy rovnice
- Transportní rovnice bublinek

B) Modely simulující fázové rozhraní

Field-based metody

- Síť je stacionární
- Fázové rozhraní je definováno hodnotou funkce ϕ
- Přídavný člen v N-S a rovnice:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot u = F$$

Moving mesh metoda

B) Modely simulující fázové rozhraní

Field-based metody

- Síť je stacionární
- Fázové rozhraní je definováno hodnotou funkce ϕ
- Přídavný člen v N-S a rovnice:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot u = F$$

Level set metoda

- $\phi \in \langle 0; 1 \rangle$
- $\rho = \rho_l + \phi(\rho_g - \rho_l)$
- $\mu = \mu_l + \phi(\mu_g - \mu_l)$

Phase field metoda

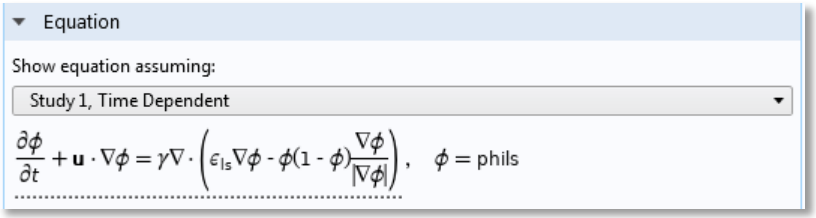
- $\phi \in \langle -1; 1 \rangle$
- Rozhodující rozdíl je ve výpočtu *F*

Moving mesh metoda

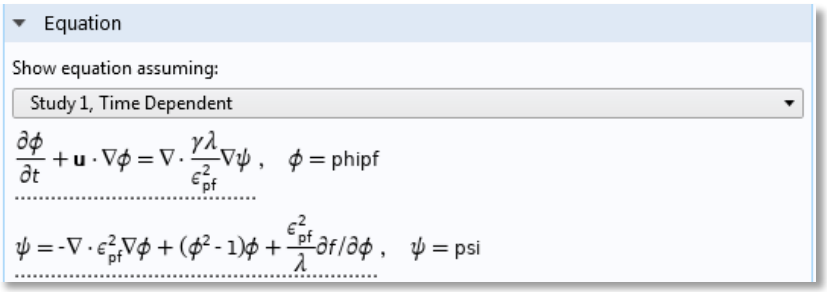
COMSOL

B1) Field-based metody

- Pravá strana transportní rovnice $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot u = F$
  - Originální Level set: F = 0 (nestabilní)
  - Level set: F -> rovnice kompaktnosti rozhraní



  - Phase field: F -> minimalizace volné energie

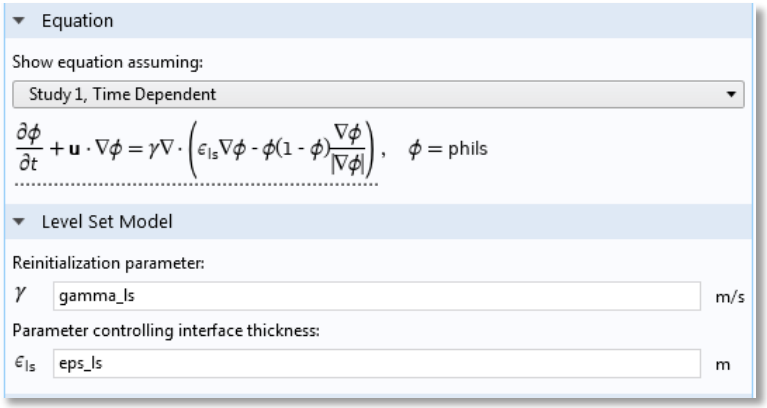


COMSOL

B2) Field-based metody

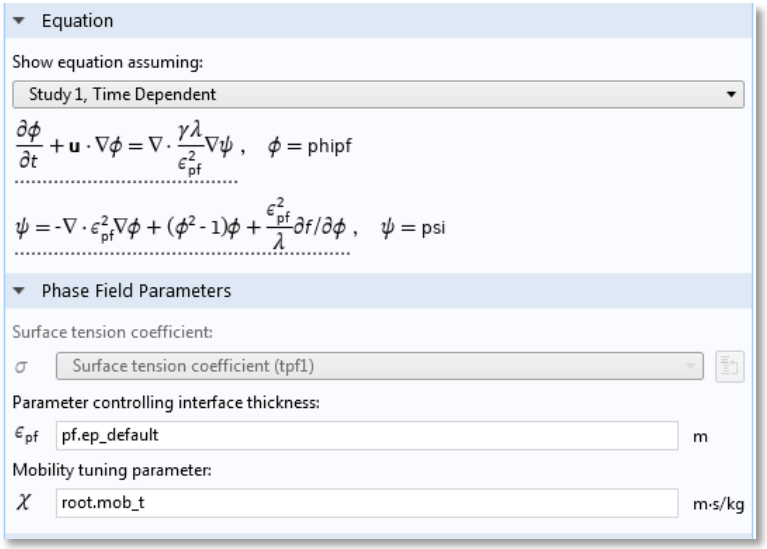
- Nový člen do N-S rovnic (povrchové napětí)
  - Level set: počítá se přímo z hodnoty ϕ (resp. z tvaru fázového rozhraní)
  - Phase field: počítá se přesněji z chemického potenciálu a gradientu ϕ na fázovém rozhraní

B3) Nastavení Field-based metod



- **gamma** příliš malé způsobí až nesmyslné trhání fázového rozhraní
- **gamma** příliš velké sníží časový krok ale zvýší kompaktnost rozhraní

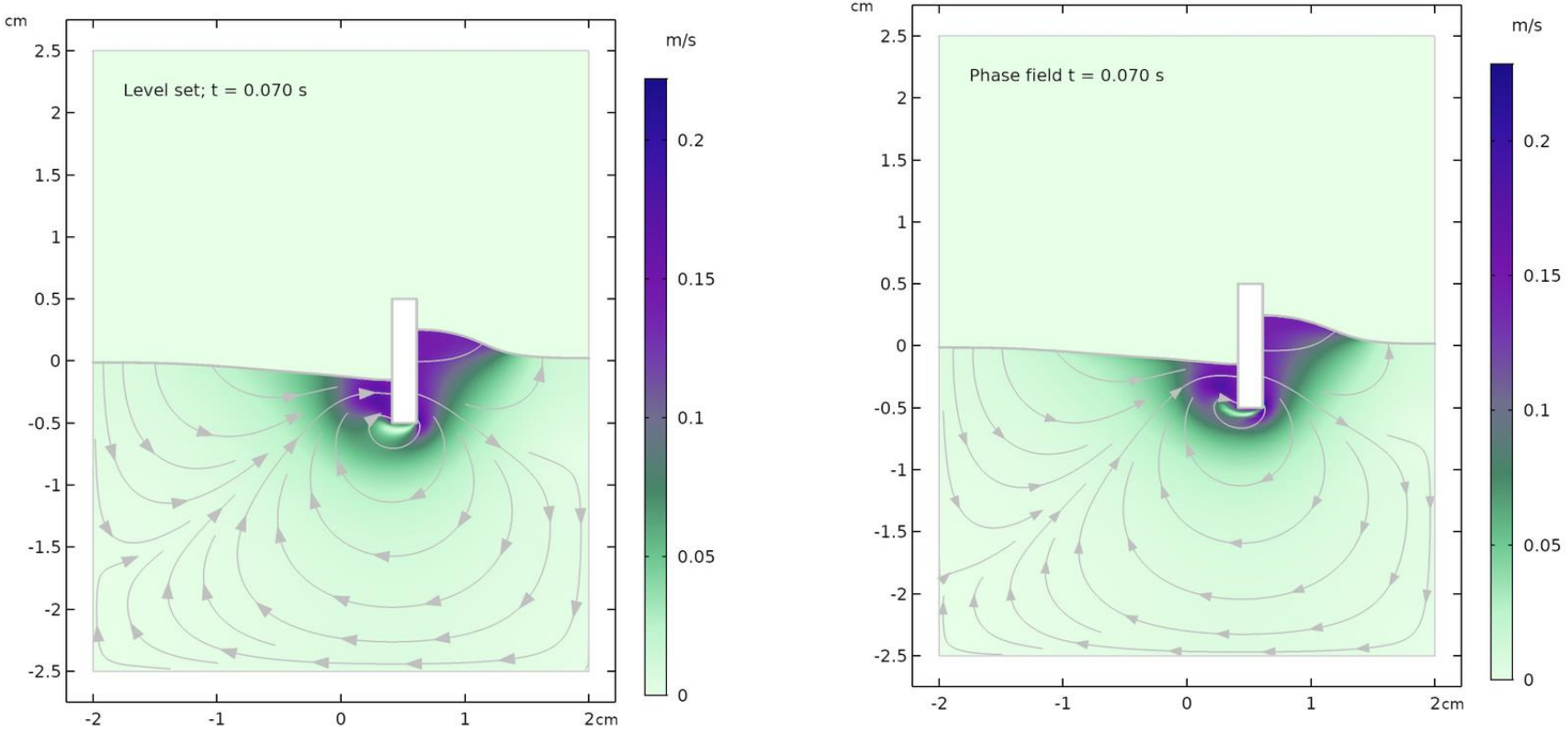
- **epsilon** příliš malé zpřesní zachycení fázového rozhraní ale zvýší výpočetní náročnost
- **epsilon** příliš velké sníží výpočetní náročnost ale rozhraní bude zachycené méně přesně



- **kappa** příliš malé může udělat rovnici nestabilní
- **kappa** příliš vysoké zvýší časovou náročnost ale ostře zachytí fázové rozhraní
- **kappa** je přímo úměrné rychlosti na fázovém rozhraní a nepřímo úměrná povrchovému napětí

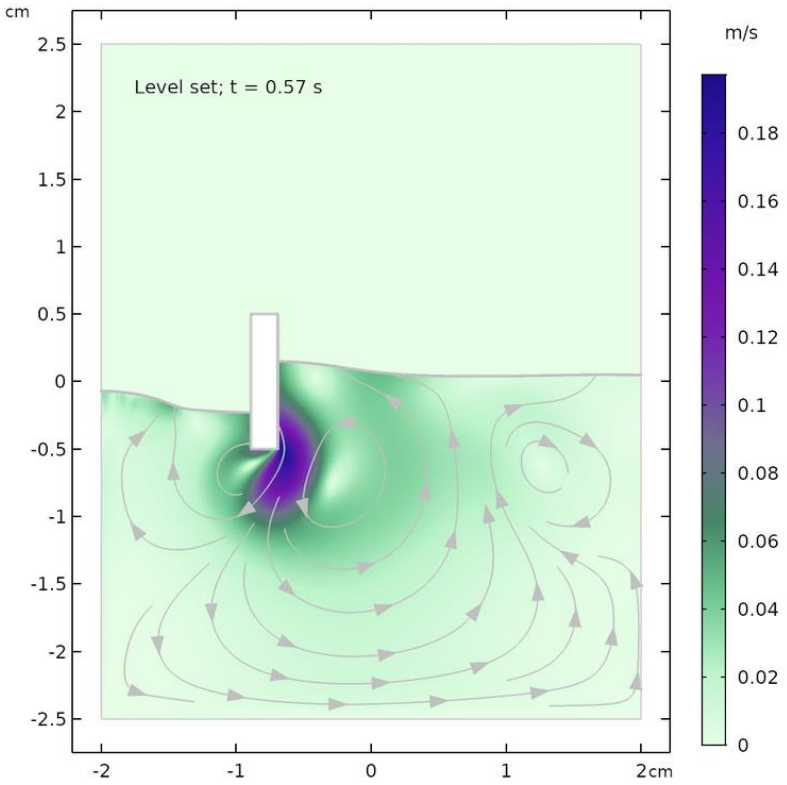
COMSOL

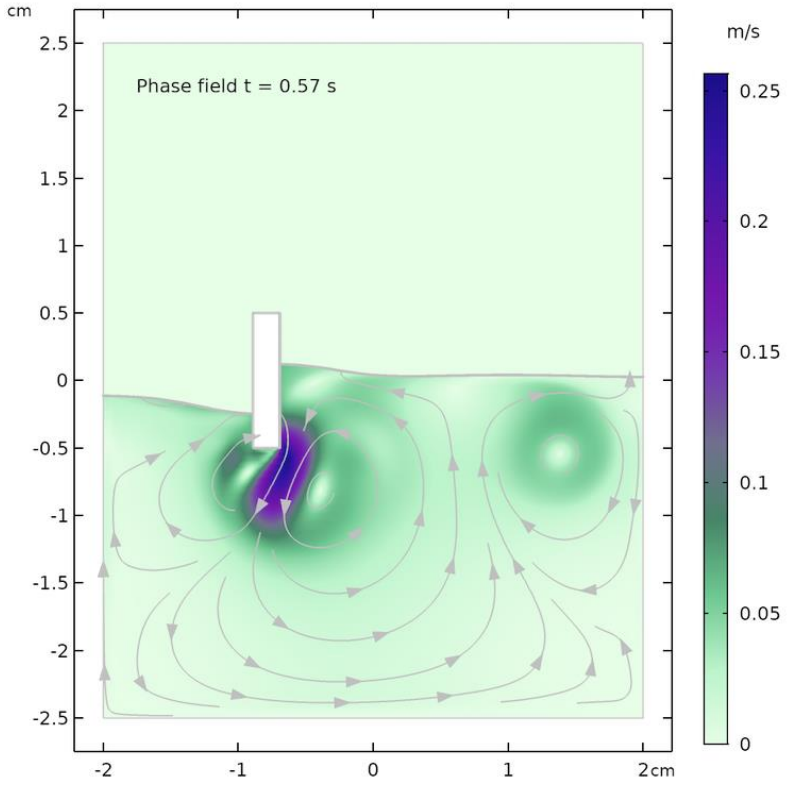
B4) Porovnání Field-based metod



Level set metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj:
www.comsol.com/blogs/two-methods-for-modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics/

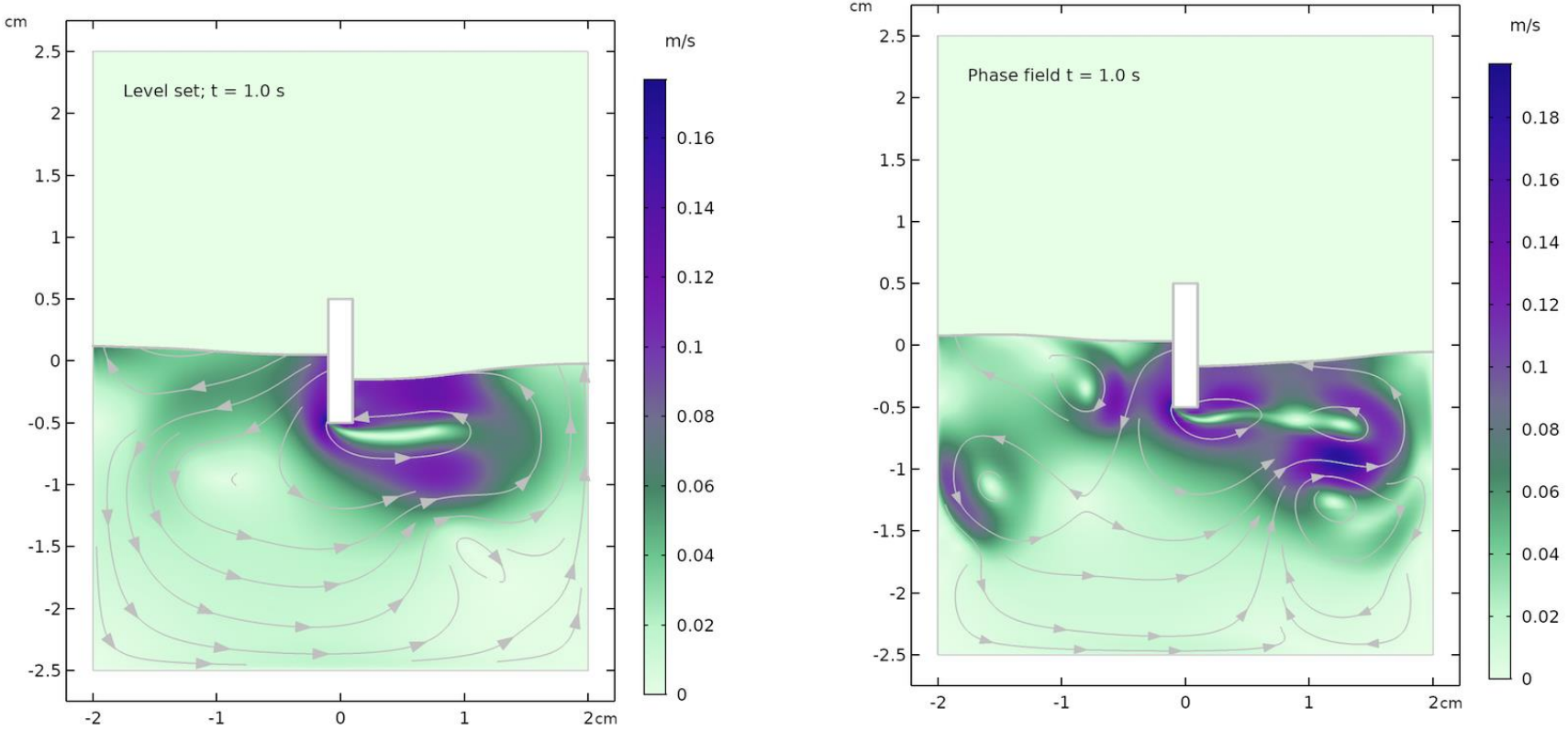
B4) Porovnání Field-based metod





Level set metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj:
www.comsol.com/blogs/two-methods-for-modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics/

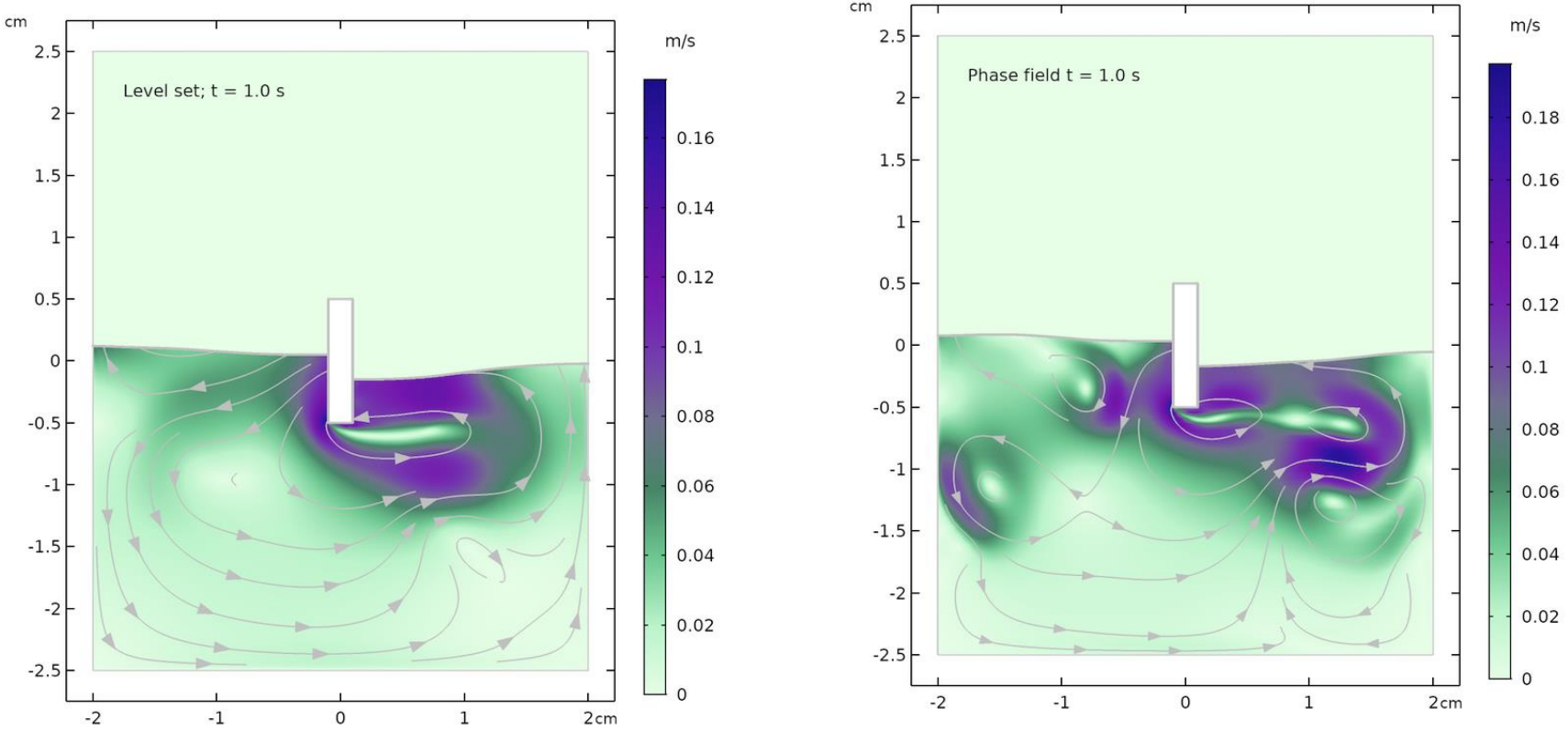
B4) Porovnání Field-based metod



Level set metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj:
www.comsol.com/blogs/two-methods-for-modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics/

COMSOL

B4) Porovnání Field-based metod



Level set metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj:
www.comsol.com/blogs/two-methods-for-modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics/

COMSOL

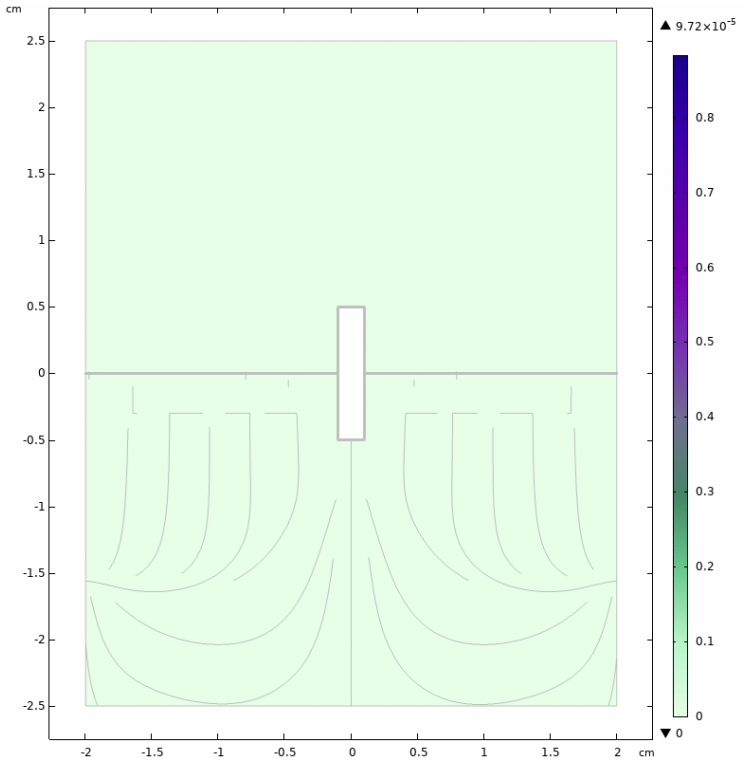
B4) Porovnání Field-based metod

- Metody se liší v přístupu k modelování povrchového napětí
- Phase field metoda má tendenci více uklidňovat hladinu
- Phase field metoda má lepší poměr přesnosti a výpočetního času než Level set metoda (časový krok u srovnávací úlohy cca 5x delší)
- Čím vyšší vliv povrchového napětí, tím je Phase Field metoda lepší volba

COMSOL

B4) Porovnání Field-based metod

- Metody se snadno vypořádávají s topologickými změnami fázového rozhraní (tříštění hladiny, bubliny)
- Metody dokáží počítat proudění nad fázovým rozhraním



Modely simulující fázové rozhraní

Field-based metody

- Síť je stacionární
- Fázové rozhraní je definováno hodnotou funkce ϕ
- Přídavný člen v N-S a rovnice:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot u = F$$

Level set metoda

- $\phi \in \langle 0; 1 \rangle$
- $\rho = \rho_l + \phi(\rho_g - \rho_l)$
- $\mu = \mu_l + \phi(\mu_g - \mu_l)$

Phase field metoda

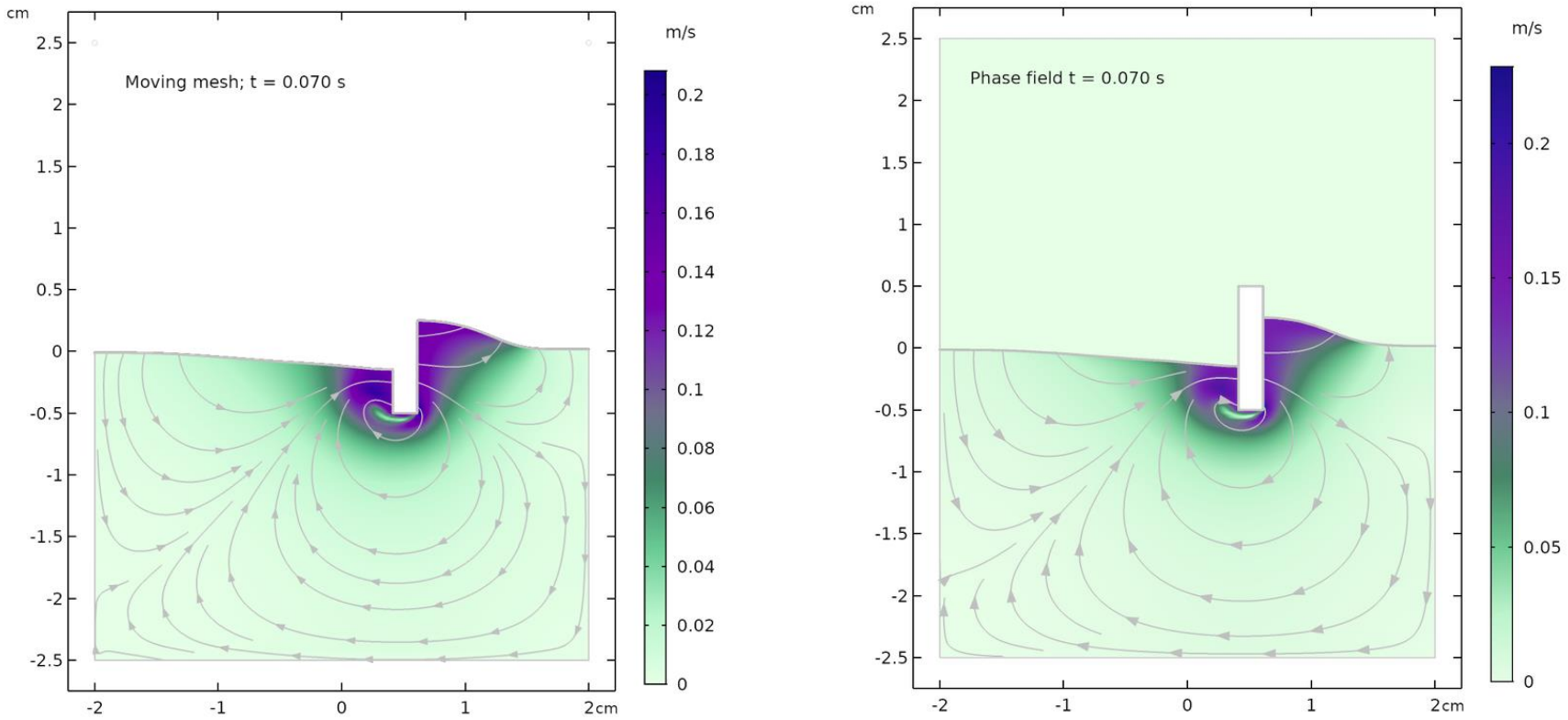
- $\phi \in \langle -1; 1 \rangle$
- Rozhodující rozdíl je ve výpočtu *F*

Moving mesh metoda

- Síť se mění s pohybem rozhraní
- Fázové rozhraní je modelováno jako geometrická plocha (křivka) oddělující dvě domény
- Povrchové tření a ostatní síly se díky tomu přidávají jako okrajové podmínky.
- Výpočet proudění (v pohyblivých souřadnicích) + rovnice pro pohyb sítě

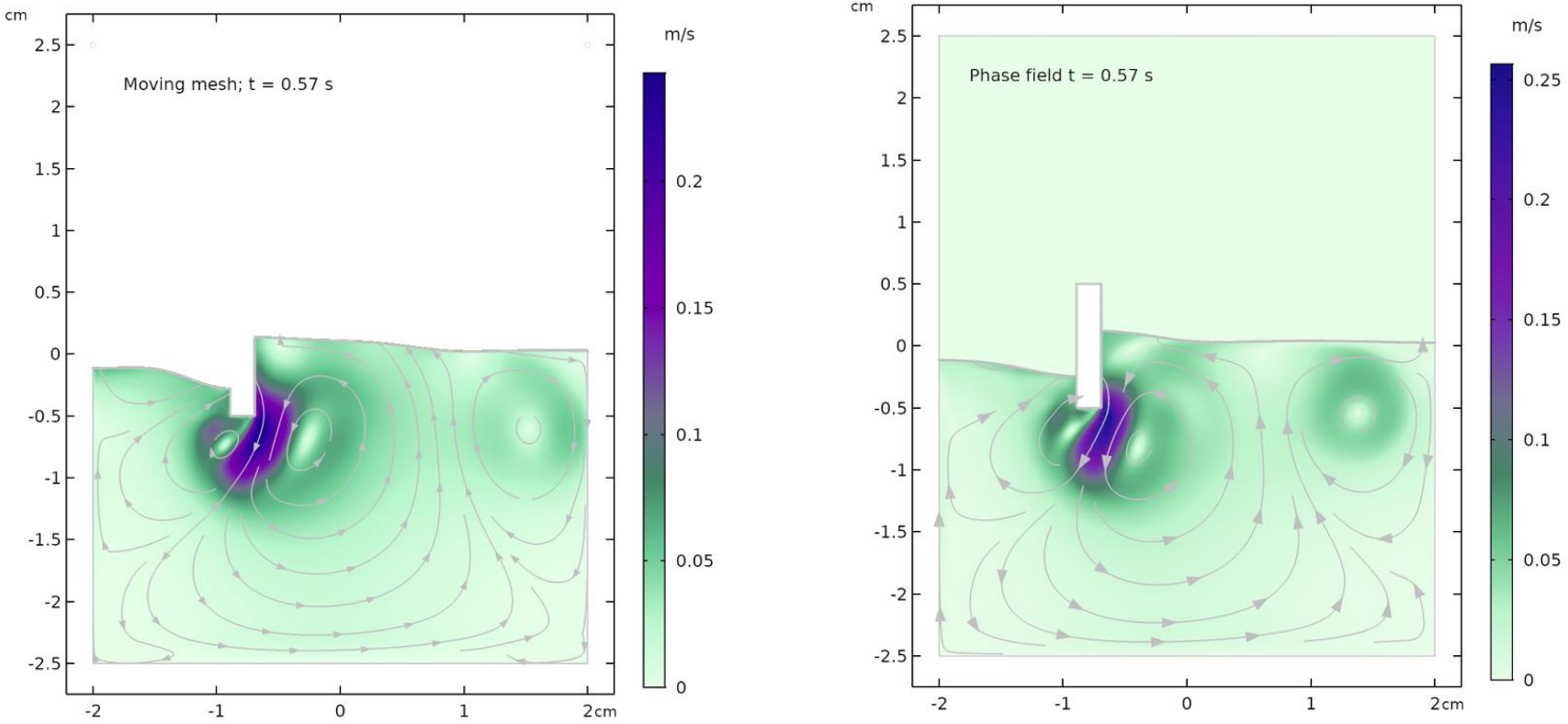
COMSOL

C1) Porovnání Moving mesh metody



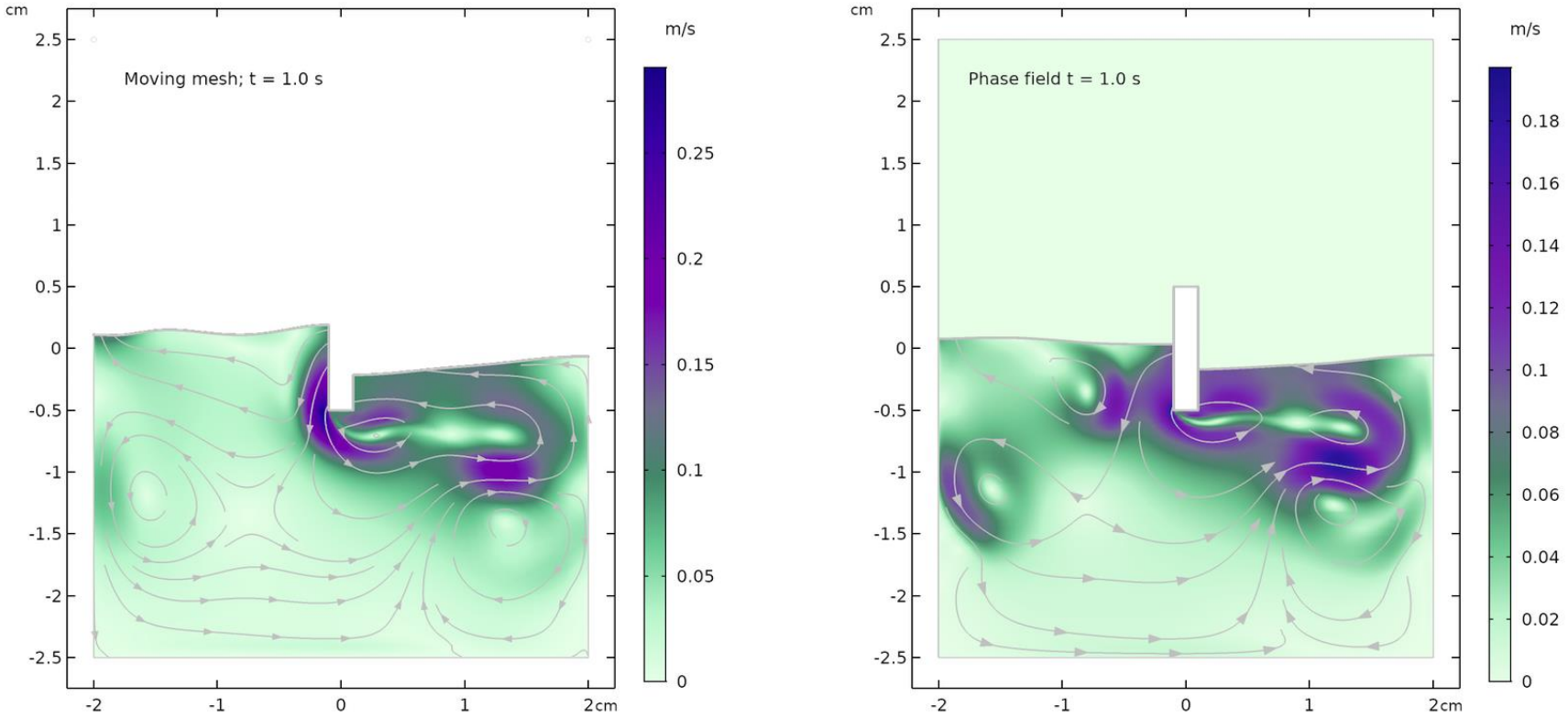
Moving mesh metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj: https://www.comsol.com/blogs/modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics-with-moving-mesh/

C1) Porovnání Moving mesh metody



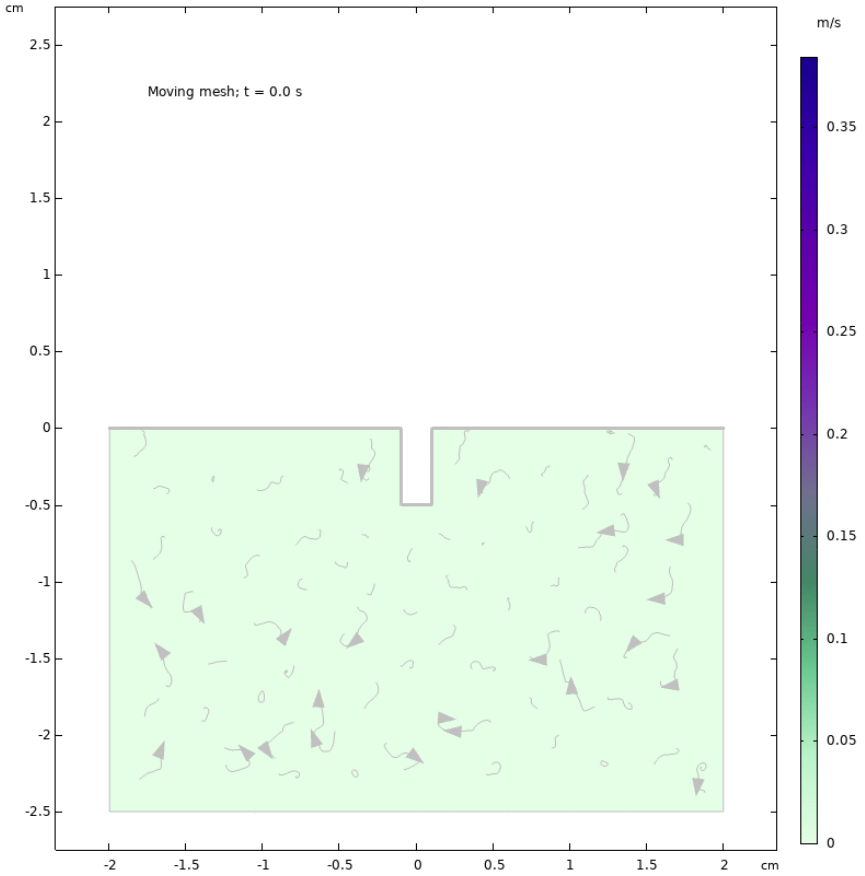
Moving mesh metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj: https://www.comsol.com/blogs/modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics-with-moving-mesh/

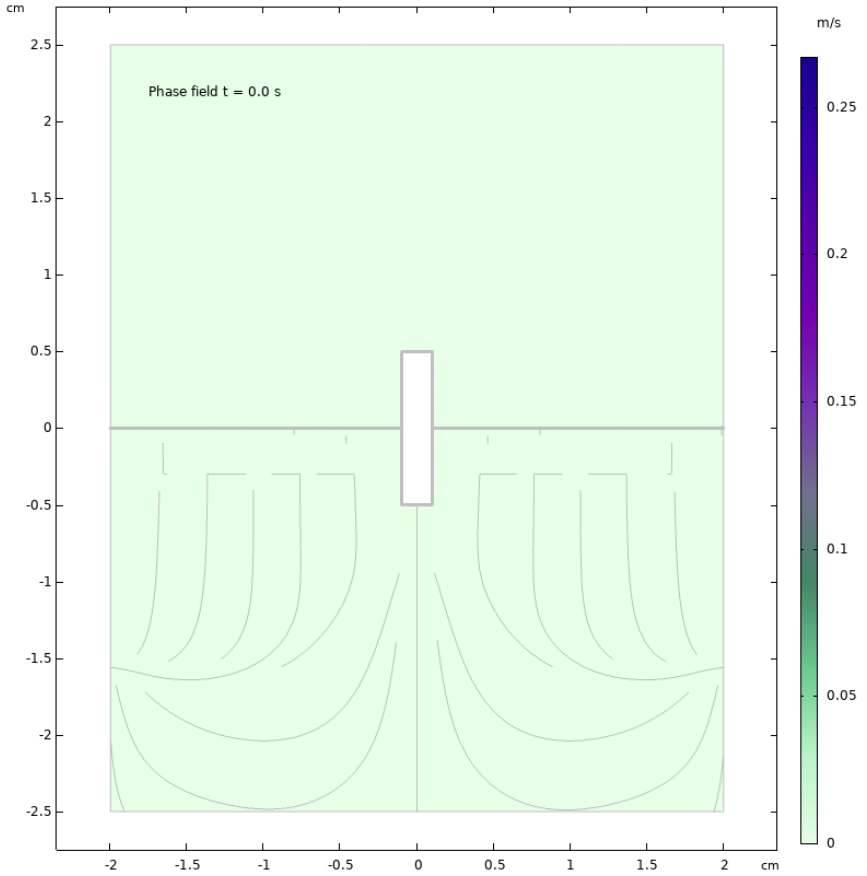
C1) Porovnání Moving mesh metody



Moving mesh metoda (vlevo), Phase-field (vpravo), zdroj: https://www.comsol.com/blogs/modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics-with-moving-mesh/

C1) Porovnání Moving mesh metody





COMSOL

C2) Klady Moving mesh metody

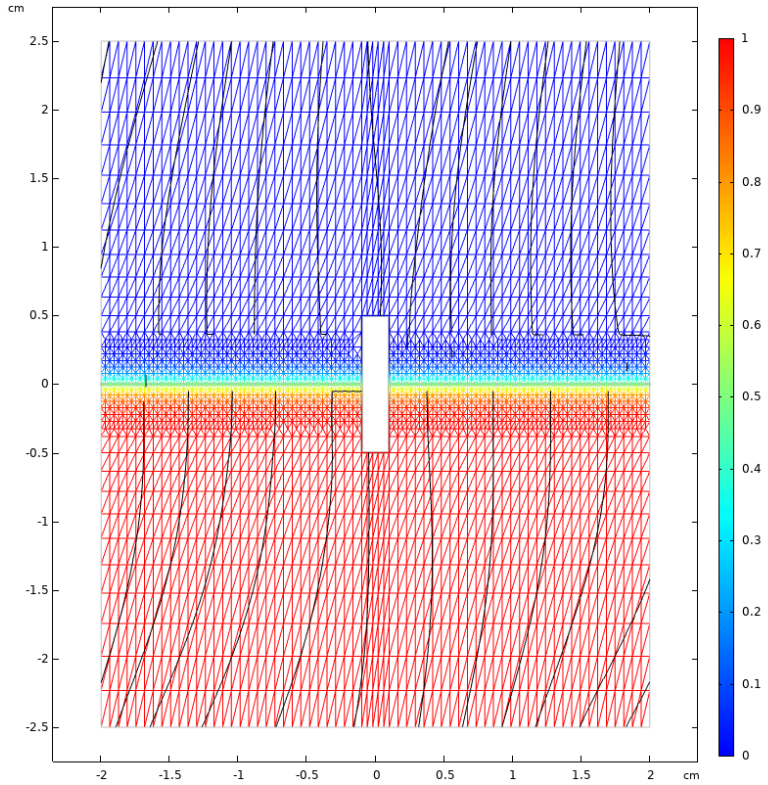
- Field-based metody a Moving mesh jsou zcela rozdílné
- Moving mesh má lepší poměr výpočetní náročnosti a přesnosti výsledků než Phase field metoda (kvůli absenci výpočtů ve vzduchu)
- Moving mesh umožňuje zadat povrchové (možno i jiné) síly přímo na rozhraní, které se chová jako BC.
- Moving Mesh lze používat pro Fluid Structure Interaction simulace

C3) Zápory Moving mesh metody

- Moving mesh nepočítá s prouděním na druhé straně rozhraní (lze provést – např. fluid-fluid podmínka v Microfluidics Module)
- Fázové rozhraní v uvedeném příkladu „vidí“ vzduch jako doménu s konstantním tlakem a nulovou rychlostí – žádné tlumení od vzduchu (lehce vyšší vlny atd.)
- Nemůže počítat s topologickými změnami rozhraní (tříštění, vlny…)

Adaptivní síťování

- Lze použít jen u Field-based metod
- Např. v místech, kde je:
  - velký gradient rychlosti
  - velký gradient fázové funkce ϕ



COMSOL

Automatické přesíťování

- Lze použít ve všech metodách, když kvalita sítě klesne (např. aspect ratio, úhly)
- Zejména u Moving mesh metody se to může snadno stát

Závěr

- Moving mesh je nejlepší volba pro výpočty bez topologických změn fázového rozhraní
- Phase Field metoda je nejlepší volba pro úlohy s topologickými změnami fázového rozhraní s efekty povrchového tření
- Level Set metoda je nejlepší volba pro úlohy s topologickými změnami fázového rozhraní se zanedbatelným povrchovým napětím

Zdroje

- www.comsol.com/blogs/two-methods-for-modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics/
- www.comsol.com/blogs/modeling-free-surfaces-in-comsol-multiphysics-with-moving-mesh/

Modely

- www.comsol.com/model/free-surfaces-with-level-set-phase-field-and-moving-mesh-a-comparison-62551
- www.comsol.com/model/rising-bubble-177
- www.comsol.com/model/drug-delivery-system-10278
- www.comsol.com/model/electrowetting-lens-10029

Modely

- www.comsol.com/model/capillary-filling-phase-field-method-1878