



粒子追踪模块 简介



粒子追踪模块简介

© 1998–2013 COMSOL

受美国专利 7,519,518; 7,596,474; 7,623,991; 和 8,457,932. 保护。

本文档和本文所述的程序根据 COMSOL 软件许可协议

(www.comsol.com/sla) 提供, 且仅能按照许可协议的条款进行使用和复制。

COMSOL、COMSOL Multiphysics、Capture the Concept、COMSOL Desktop 以及 LiveLink 均为 COMSOL AB 公司的注册商标或商标。所有其他商标均为其各自所有者的财产, COMSOL AB 公司及其子公司和产品不与上述商标所有者相关联, 亦不为其正式认可、赞助或支持。相关商标拥有者的清单请参见 www.comsol.com/tm。

版本:

2013 年 11 月

COMSOL 4.4

联系信息

请访问联系 COMSOL 页面 www.comsol.com/contact, 提交一般咨询, 联系技术支持, 或查询联系地址和电话。您也可以访问全球销售办公室页面 www.comsol.com/contact/offices, 查询地址和联系信息。

如果您需要联系技术支持, 可以进入 COMSOL Access 页面, 在线填写申请表 www.comsol.com/support/case。

其他链接:

- 技术中心: www.comsol.com/support
- 产品下载: www.comsol.com/product-download
- 产品升级: www.comsol.com/support/updates
- COMSOL 社区: www.comsol.com/community
- 活动: www.comsol.com/events
- COMSOL 视频中心: www.comsol.com/video
- 技术支持知识库: www.comsol.com/support/knowledgebase

Part number. CM022702

目录

目录.....	i
简介.....	1
应用	1
不同空间维度和求解类型对应的物理场接口	7
边界条件.....	9
二次粒子	10
粒子释放机制	10
建模工具.....	13
专用变量	13
Monte Carlo 模拟	14
助因变量和停留时间	15
粒子数据集	16
粒子轨迹图	16
庞加莱图和相图	16
粒子计算	18
粒子数据上的运算	18
直方图	18
过滤器	18
案例库窗口.....	20
计算通过层流静态混合器的粒子轨迹.....	22

简介

粒子追踪以拉格朗日形式描述问题，使用牛顿运动定律求解常微分方程。牛顿运动定律需要指定粒子质量，以及作用在粒子上的所有力。一般情况下，粒子上的作用力可以分为两类，一类来源于外场，另一类来源于粒子相互作用。其中外场作用力通常是使用 COMSOL Multiphysics 的物理场接口从有限元模型计算得到。

对于每个粒子，会对位置矢量的每个分量求解一个常微分方程。这意味着一个三维问题需要求解三个常微分方程，在二维则是两个。在每个时间步长，从外场结果中查询当前粒子所在位置每个粒子受到的作用力。如果在模型中引入粒子 - 粒子相互作用力，就还需要将它们加到总力里面。然后更新粒子的位置，重复这个过程，直到达到了模拟指定的结束时间。因为粒子追踪模块使用很常规的方程计算粒子轨迹，所以粒子追踪物理场接口可以用于模拟电磁场中的带电粒子运动、大规模的行星和银河运动，以及层流、湍流和多相流体系中的粒子运动。

应用

带电粒子

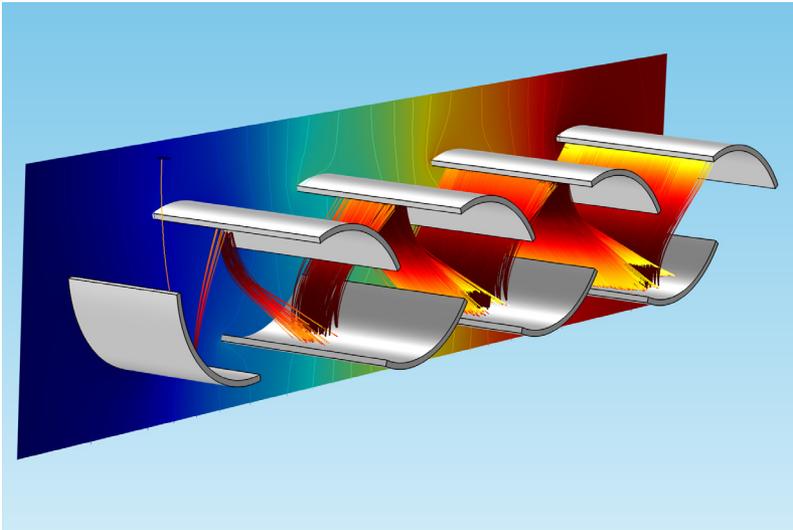
这里讨论的带电粒子，主要是指电场和磁场中的电子、单个的离子或小型离子团。主要有三种力影响这种粒子：

- 电力，由于电势梯度或者随时间变化的磁矢势产生的力。带负电荷的粒子向电场的反方向运动，带正电荷的粒子沿着电场的方向运动。其中，电力对粒子做功。
- 磁力，不对粒子上做功，但是会显著地改变它们的轨迹。磁力经常会使带电粒子出现“香蕉状”轨迹，使它们沿着正比于其质量的一定距离的磁场线轨道运动。
- 碰撞力，在粒子上做功。它对应于带电粒子与背景气体之间的相互碰撞。背景气压越高，碰撞力越重要。

如果带电粒子的数密度小于 10^{13} 1/m^3 ，就可以忽略粒子对场的作用。这样可以单独计算物理场，不用考虑粒子轨迹。得到的场可以用来计算粒子上的电、磁以及碰撞力。事实上，在一个独立的求解中单独计算粒子轨迹，可以使用高效低资源需求的迭代式求解器。

如果带电粒子的数密度高到一定程度，可能有必要引入粒子之间的库仑力。当在模型中引入粒子 - 粒子相互作用时，计算需求正比于粒子数的平方增长。当引入库仑力后，较好的常用思路是首先尝试小数量的粒子，求解模型，然后评估其影响是否重要。

带电粒子能从电场中获得大量的能量，当它们撞击到表面时可能会轰出二级粒子。对于特定的应用而言，这有可能是所期待的，也可能要完全避免的。



光电倍增管。单个入射粒子从左侧进入模型域，当它撞击到第一个电极时，轰出二级粒子，随后加速进入第二个电极。这个过程一直持续下去，直到穿过 8 个电极，使得电子密度产生指数式增长。

如果带电粒子的数密度很高，粒子可能会显著地影响周围的电场。这种对电场的改变，反过来可能会扰动带电粒子的轨迹。通过将粒子看作是电势方程中的点源，在每个单元上赋给电荷密度和电流密度额外的自由度，可以实现带电粒子和场之间的双向耦合计算。当模拟粒子-场耦合时，单个粒子的空间电荷密度均匀分散在粒子所在的单元上，所以当粒子数很高时可以得到相当精确的粒子-场相互作用的结果。

如果围绕粒子的区域中电场守恒，粒子-场之间的双向耦合可以通过耦合粒子轨迹的瞬态解和电势的稳态电荷密度解提高计算效率。这样的两个计算步骤可以循环进行，直到得到自洽的解。这种方法可以用于高效地模拟离子束或电子束。

流体中的粒子

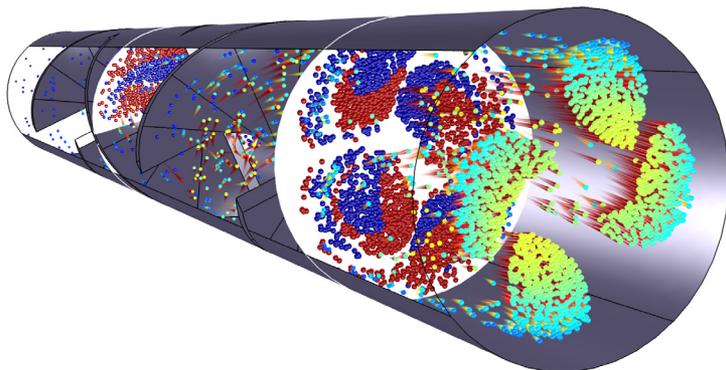
对于浸没在流体中的微观和宏观粒子，其运动常常会受到流体的曳力作用。在这种体系中通常存在两相：由气流、粒子，或者液滴形成的离散相，以及将这些粒子浸没的连续相。为了保证粒子追踪的方法有效，这些体系应该属于稀溶液或分散流动。这意味着离散相的体积分数必须远小于连续相的体积分数，通常小于 1%。当粒子的体积分数不够小时，流体归类为密集流，需要其他的模拟方法。

要认识到的一个重点是，在粒子追踪算法中，粒子并不取代它所占有的流体。

稀疏流

在稀疏流中，连续相影响粒子的运动，但是反过来不会。也就是通常所说的“单向耦合”。当模拟这样的体系时，通常最有效的做法是先求解连续相，然后

计算分散相的轨迹。例如，下图所示的结果图中，首先通过稳态求解得到速度场和压力场，然后通过瞬态求解计算粒子的轨迹。



层流静态混合器中通过彗尾图显示的粒子轨迹（带颜色）。此外，庞加莱（Poincaré）图显示出粒子轨迹与初始位置之间的偏差（蓝色 & 红色）。

稀物质流

在稀物质流中，连续相影响粒子的运动，粒子的运动反过来扰动连续相。这也就是我们常常提到的“双向耦合”。如果流体流形和粒子的质量流率随时间不发生变化，可以将粒子轨迹的瞬态解耦合到流体流动的稳态解，重复这两个步骤直到得到自治的结果。否则就应该同时计算连续相和分散相。因此，当模拟稀物质流时，计算需求远远高于稀疏流。当模拟流体 - 粒子耦合时，每个粒子受到的流体作用力平均分散在粒子所在的网格单元上。这种力，既可以使用粒子位置来直接定义流体运动方程中的源项，也可以在每个网格单元上通过定义粒子的体积力来间接赋予额外的自由度。

分散流

除了上面提到的这些效应，还可能需要考虑粒子 - 粒子相互作用。这经常被称为“四向耦合”。可以在模型中引入粒子 - 粒子相互作用，但是注意以下这些限制：

- 不支持硬球刚性碰撞。相互作用力必须随着粒子之间的距离连续变化，例如，带电粒子之间的库仑力。
- 计算时间与粒子数的平方成比例。这是因为需要计算每个粒子与其他每个粒子在所有距离上的作用力。目前没有截断机制，即一个粒子只能作用于一定半径范围内的粒子。
- 如果粒子 - 粒子相互作用定律高度非线性，可能有必要使用很小的时间步长。特别是当我们勾选了 Lennard-Jones 选项时。

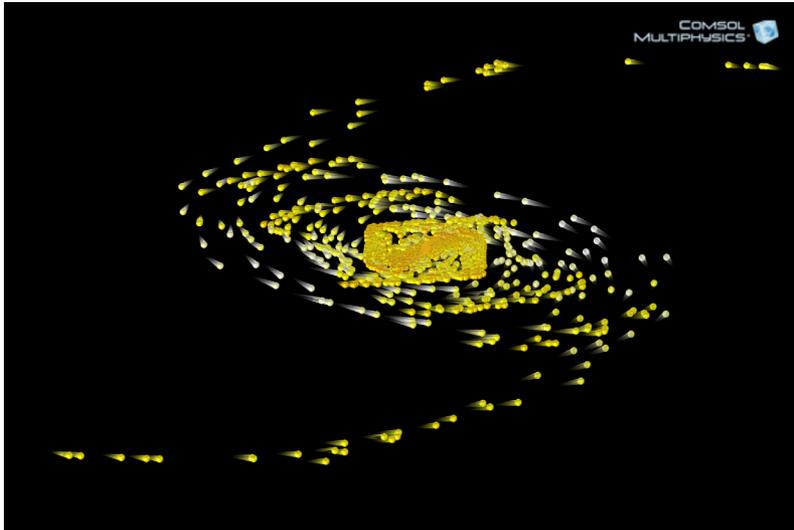
模拟对流和扩散

当模拟流体中的粒子对流和扩散时，连续性方法有一个较大的缺点。Péclet 数越高，这种方法变得越不稳定。其中 Péclet 数是对流速率与扩散速率之间的比值。通常情况下，连续性方法不能处理 Péclet 数高于 1000 的体系。在典型的微流体系中，室温下水中的 100 nm 直径的粒子，Péclet 数高达 10^8 量级。用连续性方法来处理这么高 Péclet 数流体显然是不可能的。另一方面，粒子轨迹在拉格朗日框架中计算，消除了 Péclet 数的限制。Péclet 可以从 0 到无穷大之间的任意数，不会引入数值不稳定性。通过曳力将对流施加到粒子上；通过布朗力在粒子上施加扩散。如果背景速度场为零，则粒子的运动为纯扩散运动（零 Péclet 数）。如果忽略布朗力，且背景速度场不为零，则为纯对流运动（无限大 Péclet 数）。

数学粒子追踪

在一些既不是带电粒子，也不是浸没在流体中的粒子的案例中，粒子追踪同样让人感兴趣。力学体系可以使用基于粒子的方法来模拟，利用拉格朗日或哈密尔顿形式的牛顿第二定律定义的运动方程。在很多情况下，您会发现写一个粒

子的拉格朗日或哈密顿形式的表达式会比推导运动方程更加容易。其中哈密顿公式同时求解粒子位置和动量。



通过用户自定义粒子 - 粒子相互作用表达式模拟的银河中星球的运动。

不同空间维度和求解类型对应的物理场接口

接口	图标	标签	空间维度	预置的求解类型
 AC/DC				
带电粒子追踪		cpt	三维、二维和二维轴对称	瞬态
 流体流动				
流体流动粒子追踪		fpt	三维、二维和二维轴对称	瞬态
 数学				
数学粒子追踪		pt	三维、二维和二维轴对称	瞬态

带电粒子追踪

带电粒子追踪接口 ()，可以在建模向导的 AC/DC 分支下找到，用于模拟离子和电子的轨迹。其中预置了一些预定义的电力、磁力，以及弹性碰撞力。此外，您可以使用库仑力模拟粒子 - 粒子之间的相互作用。

流体流动粒子追踪

流体流动粒子追踪接口 ()，可以在建模向导的流体流动分支下找到，用于计算在背景流体中的粒子运动。其中粒子可以受到曳力、重力，以及电、磁和声泳力等驱动。还可以添加用户自定义的力。此外，还可以计算粒子质量、温度，以及粒子 - 粒子相互作用。

数学粒子追踪

数学粒子追踪接口 () 可以用来编写底层的数学方程，例如构建带电粒子追踪和流体流动粒子追踪等。数学粒子追踪接口还可以用来指定粒子按照拉格朗日或哈密尔顿格式的运动方程。在很多情况下，与推导粒子的运动方程相

比，编写粒子的拉格朗日或哈密尔顿格式的表达式更容易。其中哈密尔顿格式的方程同时求解粒子的位置和动量，因此激活哈密尔顿格式时，自由度的数量加倍。

边界条件

当粒子与壁接触时，有六种不同的边界条件可供选择：反弹、冻结、粘住、消失、漫反射，以及普通反射。

冻结选项（缺省），当粒子撞击到壁上时，马上会固定在撞击位置，速度保持不变。因此，粒子与壁接触后，位置不再变化，而且粒子的速度保持当它撞击到壁上时刻的值不变。这种边界条件通常用于分析带电粒子与壁之间接触的刹那，速度以及能量的分布。

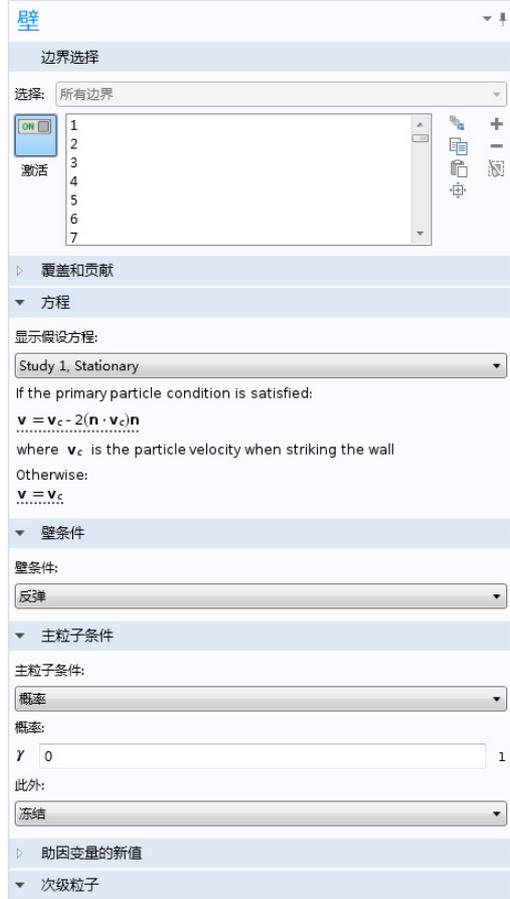
反弹，粒子在壁表面镜面反射，因此粒子上的动量保持守恒。这个选项通常用于跟踪流体中的微观粒子。

粘住，当粒子撞击到壁面时，马上固定在撞击位置。粒子的速度重置为零。这个选项通常用于不关心粒子撞击壁时的速度或能量的分布。

消失，这个条件意味着当粒子与壁接触时，不再显示它。这个选项一般用于粒子与壁接触后，不再需要显示它的位置。

漫反射，当粒子撞击壁时，按照 Knudsen 余弦定律从壁面反弹回来。也就是说，在给定的一个角度 $d\omega$ 方向上，粒子从壁面反弹回来的概率通过 $\cos(q)d\omega$ 给定，其中 q 是粒子的撞击方向与壁法向之间的夹角。总的粒子动量保持守恒。

普通反射，当粒子与壁发生撞击时，会以任意指定的速度反弹回来。既可以在笛卡尔坐标系，也可以在切向 - 法向坐标系中计算。速度分量可以是入射粒子速度，能量或者其他任意物理量的函数。注意，在这个选项中，总的粒子动量并不一定能够保持守恒。



上面这些粒子撞击壁面的边界条件可以基于表达式或概率来有条件地确定。概率选项是在边界条件上定义确切的概率。计算表达式选项只有当表达式计算结果非零时才会作用在边界条件上。

二次粒子

在某些情况下，当初级粒子撞击到壁面时，可以在域中引入二次发射的次级粒子。用户可以指定每个入射粒子产生的次级粒子数量，以及出射的初始速度等。初始速度既可以是由用户定义，或者各向同性半球分布，即，从壁面外法线的北极方向，按照恒定速度和半球速度方向释放次级粒子；也可以是通过主粒子进行反射等。

粒子释放机制

有多种方法释放粒子，可以从选定域上的格点释放，或者从指定边界的格点释放。每种情况都可以指定释放粒子的数量和频率。还有用于一些特定的释放特征的选项，详见后文。

从格点释放

可以从规则或者间次变化的格点释放粒子，除了可以指定粒子的初始坐标，还可以指定粒子的初始速度和释放粒子的时间。有四种预置的初始速度分布方式来释放粒子，分别是 Maxwellian，各向同性恒速，各向同性半球，或者各向同性锥形分布函数等。

从格点释放

▸ 方程

▼ 释放次数

释放次数: s

▼ 初始坐标

$q_{x,0}$ mm

$q_{y,0}$ mm

$q_{z,0}$ mm

▼ 初始速度

初始速度:

表达式

初始粒子速度:

<input type="text" value="0"/>	x
v_0 <input type="text" value="0"/>	y
<input type="text" value="0"/>	z

▼ 助因变量初始值

从域释放

可以根据与几何相关联的网格或者任意表达式从求解域中释放粒子。

当基于网格释放粒子时，可以指定细化因子。它的值越高，在每个网格单元内释放的粒子就越多。当基于密度释放粒子时，根据一个用户定义的表达式在释放粒子上添加权重。这是一个更灵活的选项，因为释放粒子的权重函数可以是解析表达式、随机函数、或者甚至偏微分方程的解。



入口

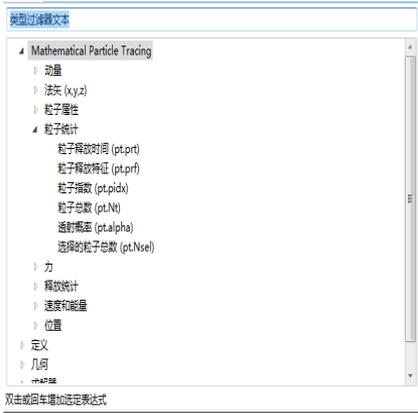
入口特征用来从边界释放粒子。与从域中的格点释放粒子类似，同样具有基于网格和密度这两种选项，此外，还有一个从选定边界均匀释放的选项。

建模工具

粒子追踪模块提供了大量预定义的专用建模工具，帮助提取出我们感兴趣的专用物理量。

专用变量

粒子追踪接口定义了很多专用变量，其中有一些只能在结果后处理时使用。这些变量可以在进行结果后处理过程中的粒子统计绘图组找到，如下所示：



图中显示了数学粒子追踪接口提供的粒子统计菜单中可供使用的变量示例。

定义了以下这些变量：

- 粒子索引。每个粒子赋有一个唯一的索引号，从 1 开始，逐渐增加到粒子总数。这个表达式可以放到函数里面，可以创建每个粒子唯一的随机力等。
- 粒子释放特征。如果在模型中有多个粒子释放特征，它可以有效地显示粒子如何从它们的初始释放位置开始进行混合。粒子释放特征变量取数值，从 1 开始，每个释放特征有一个唯一的数。
- 指定粒子的释放时间。它用于初级和次级粒子，因此可以提取出粒子释放进入模拟域的释放时间数据。
- 粒子在边界上的停止时间。

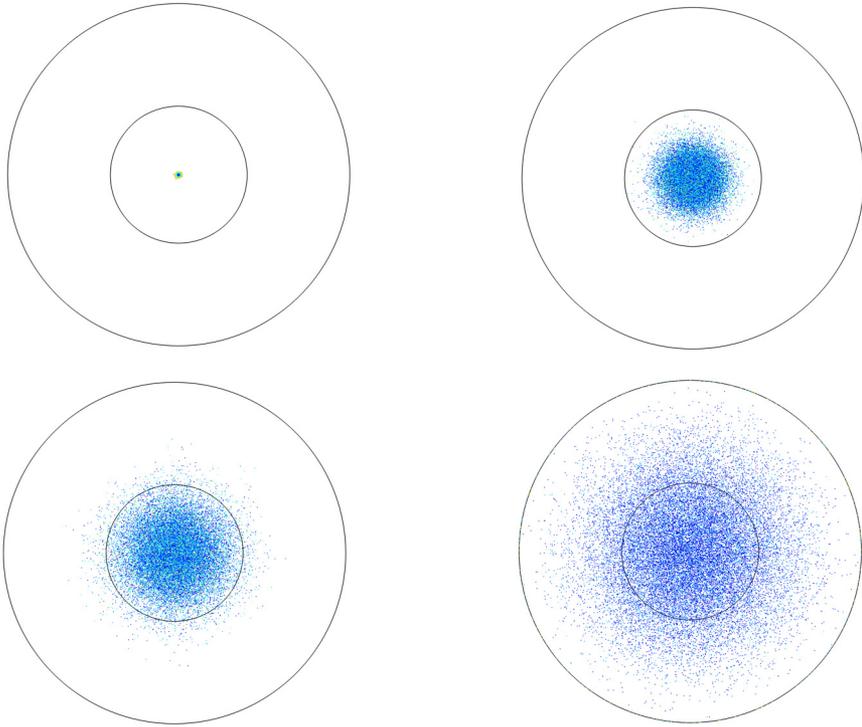
还有一些只能在结果后处理时使用的变量，它们只能在派生值节点下的全局计算节点中使用。

- 粒子总数。可能在模拟时事先并不知道释放的粒子总数，特别是模型中引入次级粒子发射的情况。
- 选择中的粒子总数。如果在粒子数据集中使用了选择，可以计算在选择中的粒子总数。
- 透射概率。在一个粒子追踪模型中，透射概率经常是需要了解的最主要的物理量。可以计算求解域、边界，或者这两者同时组合在一起的透射概率。

Monte Carlo 模拟

在模拟时有可能需要在粒子上施加随机力。在流体流动粒子追踪接口中，曳力和布朗力特征可以引入随机分布。当模型中包含这些特征时，可能有必要求解多次，并将结果平均得到需要的解。每求解一次模型，就产生一组新的随机数，用来计算由此产生的力。在布朗力特征中有一个参数，称为随机数生成器的附加输入参数，该值可以通过参数设定，因此可以用来做一个参数化扫描计算。

三个粒子追踪接口都包含速度重新初始化特征，它用来进行各种用途的 Monte Carlo 模拟，因为在每个时间步长可以根据逻辑表达式单独修改速度矢量。带电粒子追踪接口可以在弹性碰撞力特征中找到这个功能。其中带电粒子与背景气体之间的碰撞概率由碰撞频率决定，如果发生碰撞，带电粒子根据各向同性散射的弹性碰撞重新初始化自己的速度矢量。这样一来，就可以精确地描述带电粒子与背景气体之间的相互作用。同时，还可以使用一个助因变量来计算每个粒子与每种背景物质之间的碰撞次数。



源自一点的粒子布朗运动，向外扩散，
左上 $t=0s$ ，右上 $t=10s$ ，左下 $t=30s$ ，右下 $t=100s$ 。

助因变量和停留时间

助因变量可以用来记录很多事情，例如停留时间、粒子轨迹长度、积分剪切速率，等等。当在物理场中添加了一个助因变量特征时，需要为每个粒子计算一个额外的常微分方程（ODE）。

还有另一种方法来计算停留时间，即在接口属性设定中勾选储存粒子状态数据。这个选项创建粒子释放时间，以及粒子停止时间（粒子离开模拟的求解域的时间）的变量。通过这两个变量相减就很轻松地得到停留时间。

结果处理工具

粒子数据集

当求解包含粒子追踪模块接口的模型时，如果在求解步骤中勾选了生成缺省绘图选项时，就会自动创建粒子数据集 。可以在粒子数据集中添加选择，进行更多操作，例如，在结果后处理过程中计算指定求解域或边界的粒子数或分数。

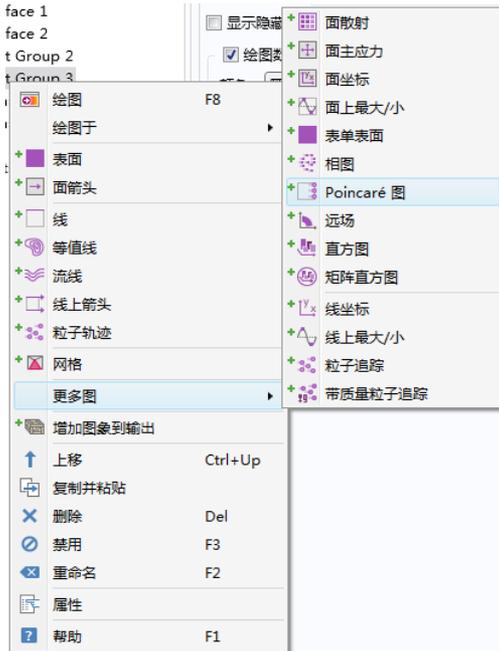
粒子轨迹图

当计算包含粒子追踪接口的求解步骤时，软件会自动创建粒子轨迹图。在这种图的选项中可以设定使用线或管渲染轨迹，还可以使用点或彗尾来进行渲染。在后两种情况下，后处理时将只会显示出粒子在选定输出时间步长所在的位置。当输出时间步长数量很少时，还可以使用内插选项，使得粒子轨迹图显得更加平滑。



庞加莱图和相图

庞加莱图可以用于二维  和三维  模型，这种类型的图常常用来显示粒子轨迹横断面上的粒子位置。庞加莱图一般是在比原有的粒子空间低一维的空间上表征粒子轨迹。



相图  是在更多图选择菜单中的一种二维绘图类型，使用它可以显示粒子轨迹的大型数据集。一般情况下，相图最典型的应用是在 x 轴绘制粒子的位置，在 y 轴绘制粒子的速度。在 xy 平面上的每个点各代表一个粒子。

粒子计算

当使用派生值下的粒子计算  选项时，可以将沿粒子轨迹上的表达式和变量的信息写入结果表单中。当这些结果写入到结果表单后，可以进行相应的后续操作和绘图。其中包含只将部分或指定数量的粒子的结果写入表单的选项。



粒子数据上的运算

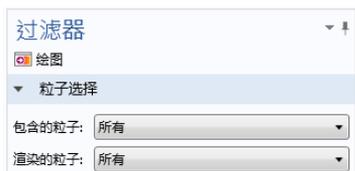
可以将积分 $\int dv$ 、平均 AV 、最大值 MAX 和最小值 MIN 运算的源数据集设定为粒子数据集 ，从而可以在粒子数据集上进行一些运算，例如，计算平均粒子速度、最大能量，等等。

直方图

当我们需要分析粒子行为的统计数据时，通常最好的办法是使用直方图来绘制。直方图将变量的值按照指定数量的直条排序。这种图最直观的应用是对一组粒子的速度和能量分布函数进行图形化排序显示。

过滤器

当我们需要图形化显示包含极大数量的粒子的模型时，会消耗很多计算资源，而且会经常出现粒子相互遮挡。这种情况下，可以使用过滤器来过滤需要渲染的粒子类型和数量。为此，右键点击粒子轨迹绘图类型，选择过滤器。



粒子类型可以设定为渲染初级粒子，次级粒子，全部或逻辑表达式。

如果粒子之间相互遮挡，或对显卡造成了相当大的负担，可以通过修改渲染的粒子选项来减少需要渲染的粒子数量。其中可以选择渲染粒子的总数或渲染粒子的分数。

案例库窗口

要打开一个粒子追踪模块案例库模型，可以在 '新建' 会话中点击 '空模型'，然后在 '主屏幕' 或主工具条上点击 '案例库' 。在随后打开的案例库窗口中，展开粒子追踪模块文件夹，然后浏览或查找目录。

点击 '打开案例'  可以在 COMSOL Multiphysics 中打开模型，或者点击 '打开 PDF 文档' ，可以阅读关于模型的背景资料，了解建模的一步一步的操作步骤。由于粒子追踪模块加强了其他模块的功能，所以有一些使用了粒子追踪接口的模型放置在其他模块的案例库文件夹下。下面列出的模块包含了这些额外的粒子追踪案例模型：

AC/DC 模块

- 电子束发散
- 离子漏斗
- 磁透镜
- 四极质谱过滤器
- 四极质谱仪

CFD 模块

- 微混合器
- 热泳

声学模块

- 声学悬浮器

等离子体模块

- 离子能分布函数

COMSOL 会经常更新案例库，向里面增加一些新模型，改进现有模型。

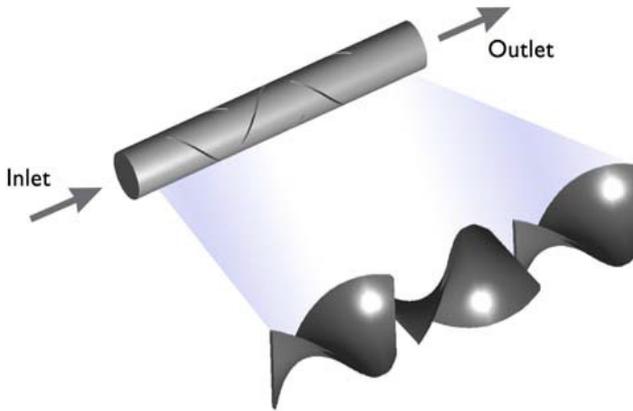
如果要检查所有可供使用的案例库更新，从菜单文件 > 帮助 (Windows 用户) 或帮助菜单 (Mac 和 Linux 用户) 选择更新案例库 ()。

在 COMSOL 案例库中的 MPH 文件有两种格式 —— 完整 MPH 文件或简洁 MPH 文件。

- 完整的 MPH 文件，包含所有的网格和解，在案例库窗口中，这些模型以带有图标 。如果 MPH 文件的大小超过 25 MB，当您将光标移动到案例库树上的案例节点时，会显示文字 '大文件' 和文件大小的提示。
- 简洁的 MPH 文件，包含所有的模型设定，但是并不包含网格和解数据，从而可以节省 DVD 上的空间（只有一小部分 MPH 文件是因为其他原因而没有解）。您可以打开这些模型，研究其设定，进行网格剖分和重新求解模型。当然，当您更新案例库的时候，也可以下载完整版本 —— 包含网格和解。这些案例在案例库窗口中带有图标 。如果您在案例库窗口中将光标移动到这些简洁的案例时，会显示没有储存解的信息。如果可以下载完整版的 MPH 文件，对应的节点背景菜单中包含下载完整案例项（）。

计算通过层流静态混合器的粒子轨迹

本节引导您基于一个已经计算过速度场的模型来了解计算粒子追踪的建模步骤。在静态混合器（也称为静止或轴向式混合器），流体泵入包含静止不动的叶片的管道。这种混合技术对于层流特别地适用，因为在这种流动范围内，只会产生很小的压力损耗。本例研究在一个扭曲叶片的静态混合器中的流动，通过计算通过混合器的悬浮示踪粒子的轨迹评估混合性能。



模型向导

Note: 这些说明适用于 Windows 的用户界面，不过在 Linux 和 Mac 界面下的差别极小。

- 1 双击在桌面上的 COMSOL 图标，启动软件。当软件打开后，您可以选择使用模型向导来创建一个新的 COMSOL 模型，或者空模型来手动创建一个模型。对于本教程，请点击 '模型向导' 按钮。

如果已经打开了 COMSOL，您可以通过从文件菜单下选择 '新建'，然后点击 '模型向导' 来启动模型向导 。

模型向导将引导您一步步逐渐建立模型。接下来的窗口是让您选择建模的空间维度。

- 2 在 '选择空间维度' 窗口，点击 '三维' 按钮 。
- 3 在 '选择物理场' 树，选择 '流体流动' > '单相流' > '层流' 。
- 4 点击 '增加' 按钮。
- 5 点击 '求解' 按钮 。
- 6 在树中选择 '预置求解' > '稳态' 。
- 7 点击 '完成' 按钮 。

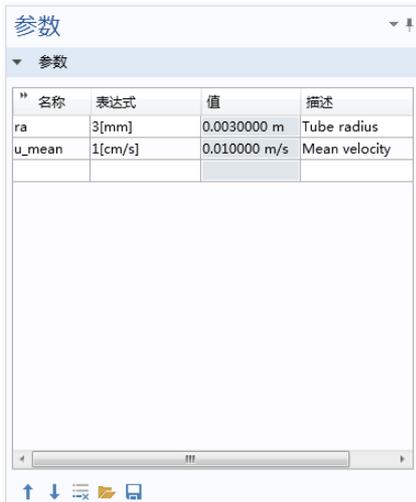
全局定义和定义

- 1 在 '主屏幕' 工具条，点击 '参数' P_i 。

Note: 在 Linux 和 Mac 上，主屏幕工具条是指 Desktop 顶部的一组控制按钮。

- 2 在 '参数' 设定窗口，找到 '参数' 栏。

3 在表中键入以下设定：



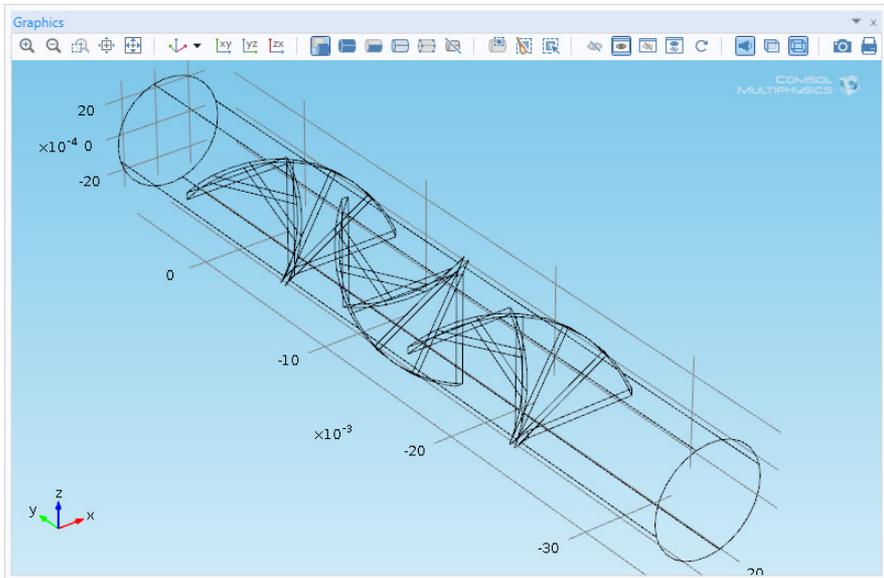
名称	表达式	值	描述
ra	3[mm]	0.0030000 m	Tube radius
u_mean	1[cm/s]	0.010000 m/s	Mean velocity

几何

混合器的几何相当复杂，因此我们直接将它从一个文件中导入进来。

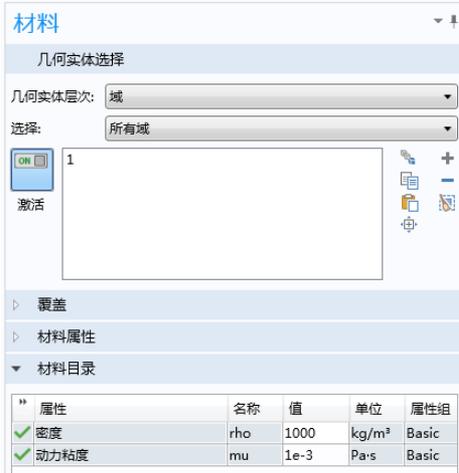
- 1 在 '主屏幕' 工具条，点击 '导入' 。
- 2 在 '导入' 设定窗口，找到 '导入' 栏。
- 3 点击 '浏览' 按钮。
- 4 浏览到案例库文件夹，双击文件 laminar_mixer_particle.mphbin。本练习中所用的文件的位置会根据您的安装路径而变。例如，如果您安装在硬盘上，可能文件路径类似于：C:\Program Files\COMSOL44\models\。

5 点击 '导入' 按钮，您会看到如下图所示的几何。



材料

- 1 在 '主屏幕' 工具条，点击 '新材料' 。
- 2 在 '材料' 设定窗口，找到 '材料目录' 栏。
- 3 在表中键入以下设定：



物理场接口

现在添加抛物型的入口速度表达式。

- 1 在 '物理场' 工具条, 点击 '边界'  , 选择 '入口'  。
- 2 只选择边界 23。
- 3 在 '入口' 设定窗口, 找到 '速度' 栏。
- 4 在 ' U_0 ' 编辑框中键入 $2*(1-(x^2+z^2)/ra^2)*u_mean$ 。

刚刚添加的边界条件相当复杂, 但这是为得到一个充分发展流动的流形所必需的。CFD、微流体和等离子体模块都有专门的层流入口边界条件, 确保层流, 其中没有必要输入速度分布的复杂表达式, 只需要输入平均流速。

- 5 在 '物理场' 工具条, 点击 '边界'  , 然后选择 '出口'  。
- 6 只选择边界 20。

网格

网格需要很精细，确保能够精确描述粒子穿过所模拟的求解域的运动。在本例中，注意确保在混合叶片附近的网格足够精确。

- 1 在'模型开发器'窗口，'组件 1' 下右键点击'网格 1'，然后选择'更多操作'>'自由剖分三角形网格' 。
- 2 点击'图形'工具条中的'线框'按钮。
- 3 只选择边界 5, 16-18, 53-55。
- 4 右键点击'组件 1'>'网格 1'>'自由剖分三角形网格 1'，然后选择'尺寸' 。
- 5 在'尺寸'设定窗口，找到'单元尺寸'栏。
- 6 从'校准'列表中选择'流体动力学'。
- 7 从'预定义'列表中选择'极端细化'。
- 8 在'模型开发器'窗口的'组件 1'>'网格 1'，点击'尺寸'。
- 9 在'尺寸'设定窗口，找到'单元尺寸'栏。
- 10 从'预定义'列表中选择'极端细化'。
- 11 点击'定制'按钮。
- 12 找到'单元尺寸参数'栏，在'曲率因子'编辑框中键入 0.15。
- 13 在'模型开发器'窗口，右键点击'网格 1'节点，选择'更多操作'>'自由剖分三角形网格' 。
- 14 只选择边界 23。
- 15 右键点击'组件 1'>'网格 1'>'自由剖分三角形网格 2'，选择'尺寸' 。
- 16 在'尺寸'设定窗口，找到'单元尺寸'栏。
- 17 从'校准'列表中选择'流体动力学'。
- 18 从'预定义'列表中选择'特别细化'。
- 19 在'模型开发器'窗口，右键点击'网格 1'，然后选择'自由剖分四面体网格' 。
- 20 在'设定'窗口点击'构建所有' 。

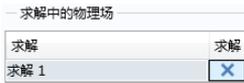
求解

- 1 在'主屏幕'工具条，点击'计算' 。

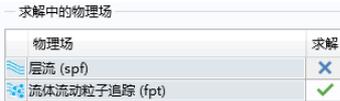
模型向导

现在计算得到了流体速度场，接下来通过增加物理场接口和新的求解来计算粒子追踪。

- 1 在 '主屏幕' 工具条，点击 '增加物理场' 。
- 2 切换到 '增加物理场' 窗口。
- 3 在 '增加物理场' 树选择 '流体流动' > '流体流动粒子追踪' 。
- 4 在 '求解' 栏找到 '物理场'。在 '求解' 列，通过点击绿色的复选框 取消 '求解 1' 中的激活，它将转变成叉字 ，说明将在 '求解 1' 中不求解这个物理场接口。如下图所示：



- 5 点击 '增加到组件' 按钮 。
- 6 在 '主屏幕' 工具条，点击 '增加求解' 。
- 7 切换到 '增加求解' 窗口。
- 8 找到 '求解' 栏，在树上选择 '预置求解' > '瞬态' 。
- 9 在 '求解' 栏找到 '物理场'。在表上，点击 '层流' 接口旁边的绿色复选框 ，使得它如下图所示：



- 10 点击 '增加求解' 按钮 。

11

物理场接口

- 1 在 '物理场' 工具条，点击 '域' ，然后选择 '曳力' 。
- 2 只选择域 1。
- 3 在 '曳力' 设定窗口，找到 '曳力' 栏。
- 4 从 'u' 列表中选择 '速度场 (spf/fp1)'。
- 5 从 ' μ ' 列表中，选择 '动态粘度 (spf/fp1)'。

设定的目标是实现在释放粒子的时候，速度场越高，粒子越密集。为此您需要在粒子初始位置中使用密度选项。

- 6 在 '物理场' 工具条，点击 '边界' ，选择 '入口' 。
- 7 在 '模型开发器' 窗口，'组件 1' > '流体粒子追踪'  下点击 '入口 1' 。
- 8 只选择边界 23。
- 9 在 '入口' 设定窗口，找到 '初始位置'。
- 10 从 '初始位置' 列表中选择 '密度'。
- 11 在 'N' 编辑框中键入 3000。
- 12 在 ' ρ ' 编辑框中键入 spf.U。
- 13 找到 '初始速度'，在 'u' 列表中，选择 '速度场 (spf/fp1)'。
- 14 在 '物理场' 工具条，点击 '边界' ，选择 '出口' 。
- 15 只选择边界 20。
- 16 进入到 '模型开发器' 窗口中的 '组件 1' > '流体流动粒子追踪 1' ，点击 '粒子属性 1' 。
- 17 在 '粒子属性' 设定窗口，找到 '粒子属性'。
- 18 在 ' d_p ' 编辑框中键入 5E-7[m]。

求解 2

- 1 在 '模型开发器' 窗口，展开 '求解 2' 节点，然后点击 '步骤 1: 瞬态' 。
- 2 展开 '因变量值' 栏，勾选 '不求解的变量值' 复选框。
- 3 从 '方法' 列表中选择 '解'。
- 4 从 '求解' 列表中选择 '求解 1, 稳态'。
- 5 找到 '求解设定' 栏，点击 '范围' 按钮 。
- 6 切换到 '范围' 对话框。
- 7 在 '步骤' 编辑框中键入 0.2。
- 8 在 '停止' 编辑框中键入 5。

9 点击 '替换' 按钮，求解设定应该如下所示：



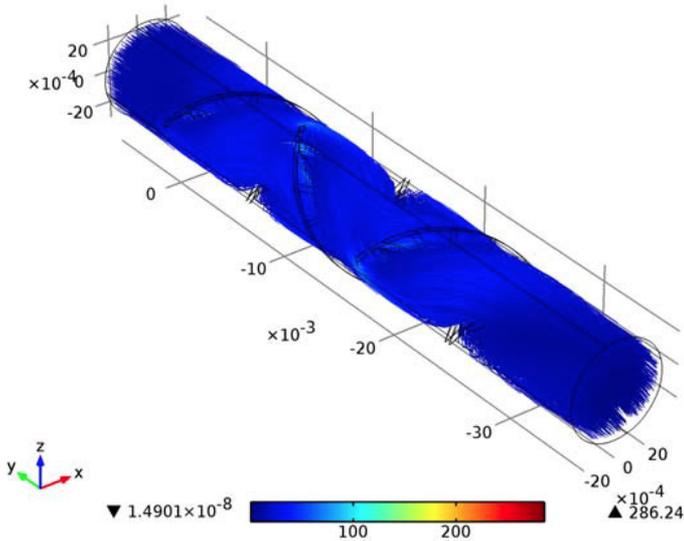
10 在 '主屏幕' 工具条，点击 '计算' 。

结果

缺省情况下，当模型结束求解后会停留在粒子轨迹（fpt）节点。

- 1 在 '粒子轨迹（fpt）'  设定窗口，点击展开 '颜色图例'。
- 2 从 '位置' 列表中选择 '底部'。
- 3 在 '模型开发者' 窗口，展开 '粒子轨迹 (fpt)'  节点，然后点击 '粒子轨迹 1' 。
- 4 在 '粒子轨迹' 设定窗口，找到 '颜色和样式'。
- 5 找到 '线样式'，从 '类型' 列表中选择 '线'。
- 6 找到 '点样式'，从 '类型' 列表中选择 '无'。

- 7 在'模型开发器'窗口, 展开'结果'>'粒子追踪 (fpt)'>'粒子轨迹 1' 节点, 然后点击'颜色表达式 1'。
- 8 在'颜色表达式'设定窗口, 点击'表达式'栏右上角的'替换表达式'按钮, 从菜单中选择'层流'>'剪切速率 (spf.sr)'。
- 9 点击'绘图'按钮。
- 10 点击'图形'工具条中的'缩放至视窗大小'按钮。



现在创建一个新的粒子数据集, 在出口设定选择, 用来计算透射概率。

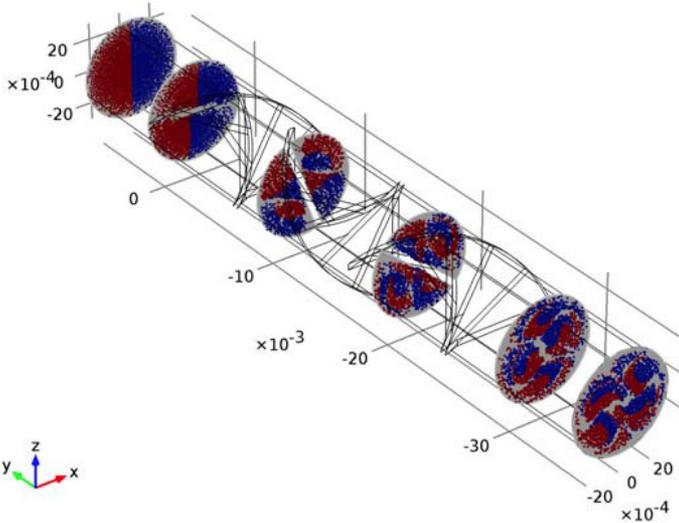
- 1 在'模型开发器'窗口, 展开'结果'>'数据集'节点。
- 2 右键点击'粒子 1', 选择'复制'。
- 3 右键点击'结果'>'数据集'>'粒子 2', 然后增加'选择'。
- 4 在'选择'设定窗口, 找到'几何实体层次'栏。
- 5 从'几何实体层次'列表中选择'边界'。
- 6 只选择边界 20。
- 7 在'结果'工具条, 点击'全局计算'。
- 8 在'全局计算'设定窗口, 找到'数据'栏。
- 9 从'数据集'列表中选择'粒子 2'。

- 10 从 '时间' 选择列表中选择 '最后一步'。
- 11 点击 '表达式' 栏右上角的 '替换表达式' 按钮 ，从菜单中选择 '流体流动粒子追踪' > '粒子统计' > '透射概率 (fpt.alpha)'。
- 12 点击 '计算' 按钮 ，透射概率大约为 0.8。

一种显示粒子如何相互混合的有效方法是使用庞加莱图，它通过在每个切面（也就是所谓的庞加莱截面）上放置彩色点来显示每个粒子在经过该切面时所处的位置。

- 1 在 '模型开发器' 窗口，在 '结果' 下右键点击 '数据集'，选择 '截面' 。
- 2 在 '截面' 设定窗口，找到 '数据' 栏。
- 3 从 '数据集' 列表中选择 '粒子 1'。
- 4 找到 '面数据' 栏，从 '面' 列表中选择 'xz 平面'。
- 5 在 'y 坐标' 编辑框中键入 0.006。
- 6 勾选 '辅助平行面' 复选框。
- 7 在 '距离' 编辑框中键入 0.006 0.016 0.026 0.036 0.042。
- 8 点击 '绘图' 按钮 。
- 9 在 '主屏幕' 工具条，点击 '增加绘图组'，然后选择 '三维绘图组'。
- 10 在 '三维绘图组' 设定窗口，找到 '数据' 栏。
- 11 从 '数据集' 列表中选择 '粒子 1'。
- 12 点击展开 '颜色图例' 栏，从 '位置' 列表选择 '底部'。
- 13 在 '三维绘图组' 工具条，点击 '更多绘图'，然后选择 'Poincaré 图'。
- 14 在 '模型开发器' 窗口，在 '结果' > '三维绘图组 4' 下点击 'Poincaré 图 1'。
- 15 在 'Poincaré 图' 设定窗口，找到 '数据' 栏。
- 16 从 '切面' 列表中选择 '切面 1'。
- 17 找到 '颜色和样式' 栏，勾选 '半径比例因子' 复选框。
- 18 在编辑框中键入 6E-5。
- 19 点击 '绘图' 按钮 。
- 20 右键点击 '结果' > '三维绘图组 4' > 'Poincaré 图 1'，然后选择 '颜色表达式'。
- 21 在 '颜色表达式' 设定窗口，找到 '表达式' 栏。
- 22 在 '表达式' 编辑框中键入 $at(0, qx < 0)$ 。
- 23 找到 '颜色和样式' 栏，清除 '颜色图例' 复选框。
- 24 在 '模型开发器' 窗口，右键点击 '三维绘图组 4'，然后选择 '表面' 。
- 25 在 '表面' 设定窗口，找到 '数据' 栏。

- 26 从 '数据集' 列表中选择 '截面 1'。
- 27 找到 '表达式' 栏, 在 '表达式' 编辑框中键入 1。
- 28 找到 '颜色和样式' 栏, 从 '着色' 列表中选择 '均匀'。
- 29 从 '颜色' 列表中选择 '灰色'。
- 30 点击 '图形' 工具条上的 '切换到缺省三维视图' 按钮 .
- 31 点击 '绘图' 按钮 .



上图显示了 6 个庞加莱截面上的粒子的位置, 其中颜色表示每个粒子初始时刻所在的位置。因此, 红色的粒子表示初始位置位于 $x < 0$, 蓝色的表示初始位置 $x > 0$ 。其中 `at()` 算子用来给粒子标上初始位置的颜色。第一个庞加莱截面 (上图中最左侧的截面) 清晰地表明从 $x < 0$ 的坐标出发的粒子。当它们随着流场向前流动时, 开始相互混合。当它们达到混合器的末端时, 粒子还没有完全混合—— 还有很明显的完全红色以及完全蓝色的粒子团。

