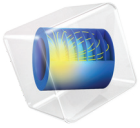


微流体模块

简介

5.6

COMSOL

微流体模块简介

© 1998–2018 COMSOL 版权所有

受 cn.comsol.com/patents 中列出的专利和美国专利 7,519,518、 7,596,474、 7,623,991、 8,457,932、 8,954,302、 9,098,106、9,146,652、 9,323,503、 9,372,673 及 9,454,625 的保护。专利申请中。

本文档和本文所述的程序根据 COMSOL 软件许可协议 (cn.comsol.com/comsol-license-agreement) 提供，且仅能按照许可协议的条款进行使用和复制。

COMSOL、 COMSOL 徽标、 COMSOL Multiphysics、 COMSOL Desktop、 COMSOL Server 和 LiveLink 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，亦不由其担保、赞助或支持。相关商标所有者的列表请参见 cn.comsol.com/trademarks。

版本 : COMSOL 5.5

联系信息

请访问 “联系 COMSOL” 页面 cn.comsol.com/contact，以提交一般查询、联系技术支持或搜索我们的联系地址及号码。您还可以访问全球销售办事处页面 cn.comsol.com/contact/offices，以获取地址和联系信息。

如需联系技术支持，可访问 COMSOL Access 页面并填写在线申请表，位于：cn.comsol.com/support/case 页面。其他有用的链接还包括：

- 技术支持中心：cn.comsol.com/support
- 产品下载：cn.comsol.com/product-download
- 产品更新：cn.comsol.com/support/updates
- COMSOL 博客：cn.comsol.com/blogs
- 用户论坛：cn.comsol.com/community
- 活动：cn.comsol.com/events
- COMSOL 视频中心：cn.comsol.com/video
- 技术支持知识库：cn.comsol.com/support/knowledgebase

文档编号：CM021902

目录

微流体模块 5
微流体装置：物理场和应用 7
微流体模块物理场接口指南 11
根据空间维度和研究类型排列的物理场接口 16
教学示例：可控扩散微型混合器 19

微流体模块

微流体模块用于工程师和科学家理解、预测和设计微流体系统。在设计流程中使用仿真工具日益广泛，因为它们可以加深理解、减少原型成本，以及加速开发。微流体模块可以让用户快速和精确地模拟单相流动、多相流动、多孔介质流动、电动流动，以及轻微稀薄气体流动等。

微流体模块可以求解二维和三维空间中的稳态和瞬态流动。以预定义的物理场接口形式进行设置的方程适用于各种不同类型的流动，称之为微流体物理场接口。流体流动接口用来定义流体流动问题的物理量包括压力和流速，以及物理属性，例如粘度和密度等。不同的物理场接口可用于模拟一系列的微流体流动。例如，层流、蠕动流、两相流 （相场、水平集和动网格）、多孔介质流 （**达西定律**、 Brinkman 方程，或**自由和多孔介质流** — Brinkman 方程与层流耦合）和滑移流。与**稀物质传递**接口耦合，可以处理多种物质传递。这些物理场接口可以很轻松地与其他物理场接口进行耦合，例如，与 COMSOL 静电或电流接口耦合，可以求解电动流动等多物理场问题。

对于每个微流体物理场接口，底层物理原理通过偏微分方程的形式表达，并与对应的初始值和边界条件相结合。 COMSOL 的设计通过向用户提供由每个特征求解的方程和对底层方程系统完全的访问权限来强调物理现象。而且用户还有非常灵活的方法向系统中添加自定义方程和表达式。例如，如果需要模拟显著地影响流体粘度的物质传递现象，只需要键入随浓度变化的粘度表达式 —— 不需要脚本或编程（请参见教学示例：可控扩散微型混合器）。当 COMSOL 总装方程时，由用户定义的表达式生成的复杂耦合会自动地包含到方程系统中。这些方程随后使用有限元方法和各种工业级求解器进行求解。当获得解之后，可以通过各种后处理工具对数据进行解读，并通过预先定义好的绘图自动绘制结果图显示装置的响应。

COMSOL 提供灵活的方法来计算各种物理场，包括预定义的物理量，例如，压力、速度、剪切速率，或涡度 （通过易用的菜单调用）以及任意用户定义表达式。

要对微流体装置建模，首先需要在软件中定义几何。然后选择正确的材料，并添加合适的微流体物理场接口，在其中设置初始值和边界条件。接下来，定义网格 —— 很多情况下， COMSOL 可以依据物理场接口来剖分得到默认的网格，适用于其针对的问题。接下来选定求解器，同样对于物理场接口提供默认的适用求解器，然后求解。最后对结果进行可视化。所有这些操作步骤都可以从 COMSOL Desktop 实现。

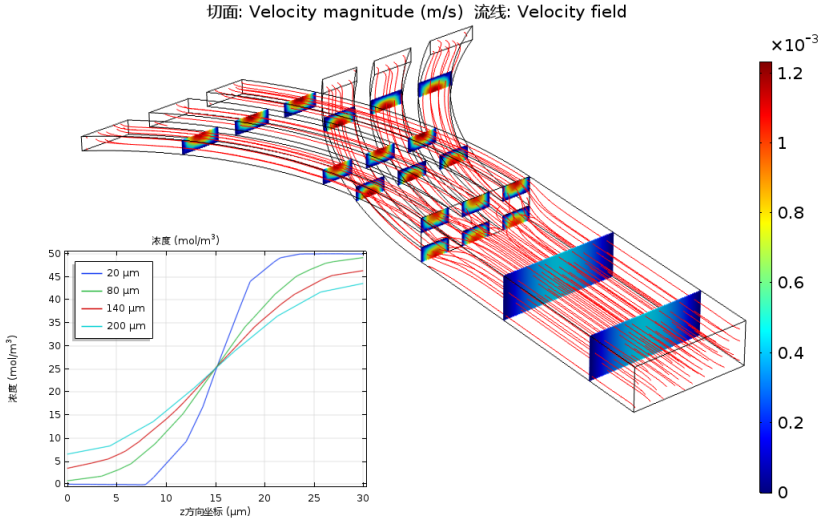
微流体装置：物理场和应用

微流体流动发生于长度尺度远小于宏观流动的情况，在微尺度上操作流体有很多好处 — 典型的微流体系统更小、操作更快，比相应的宏观流体所需的液体更少。因为系统的表面积对体积之比远大于宏观系统，因此能量的输入和输出也更容易控制（例如，化学反应产生的热）。

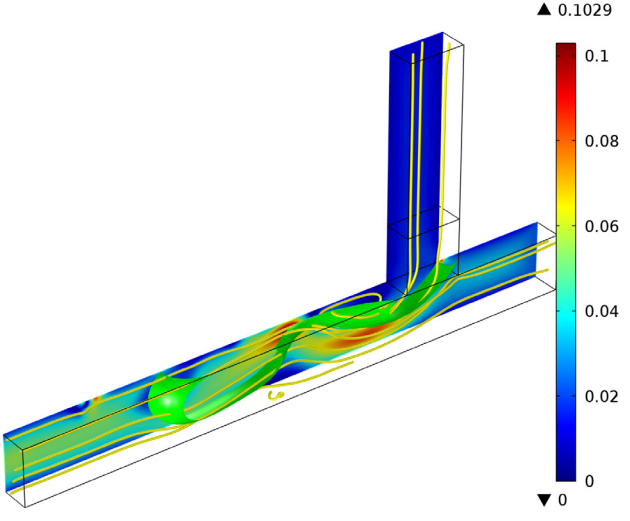
通常情况下，随着流体流动的长度尺度 (L) 减少，随系统的表面积变化的属性变得比那些随体积变化的属性更加重要。在流体流动中很明显的是粘性力，它是由等速度面的剪切产生 （随 L^2 变化），其重要性将超过惯性力 （随体积尺度 L^3 变化）。

雷诺数 (Reynolds, Re) 是这两种力之间的比例关系的表征，通常很小，所以流动通常为层流 (Re<1000)。在很多情况下，可以应用蠕动 （斯托克斯）流 (Re«1)。层流和蠕动流使得混合特别困难，因此传递常常受限于扩散。扩散的时间尺度随 L^2 变化，但是即使是在微流体系统中，扩散也经常是缓慢的过程，这意味着微流体系统中的化学传递很小。下图显示设计用来增强层流中的两种流体之间的混合效果的装置中的流动。混合器壁上显示压力等值面，在入口和出口边界，以及两组管道（携带不同流体）交汇处显示速度大小。

图上还显示了流线 （红色）。插图显示只能分散于其中一种流体的某种扩散物质的浓度，图示为沿着混合器中心流下的垂直线绘制。

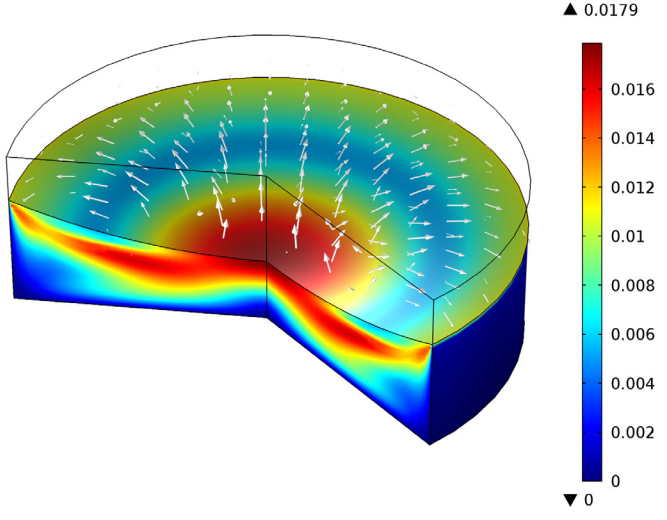


当存在多相时，在小长度尺度上，表面张力效应将变得比重力和惯性力更重要。拉普拉斯压力 （跨越两相界面的压力突变）、毛细管力，以及马兰戈尼力都随 1/L 变化。下图显示随着油流动进入具有第二种流体的管道中时，油滴破裂产生乳液的现象。显示了速度场的流线，以及对称面上的流速分布。两相边界显示为绿色。



多孔介质流动也可以在微尺度几何中发生。因为多孔介质的渗透率变化尺度为 L^2（其中 L 是平均孔隙半径），当孔隙尺寸在微米级别时，流动常常受摩擦主导，可以使用达西定律来描述。对于中间级别的流动，本模块还提供 Brinkman 方程物理场接口来模拟对应的流体流动。

在微尺度可以观察到很多影响流体流动的电流体效应。对于给定的电势，电场强度变化尺度为 1/L，使其很容易用较低的电势施加较大的电场到流体。在电渗现象中，流体表面的双电层 (EDL) 中未补偿的离子被电场驱动，使得流体发生流动。流体中的带电或极化粒子受到电泳和介电泳力，也可以产生粒子运动，与此类似的还有磁泳现象。在微尺度器件中，还可以很轻松地操纵电润湿现象的接触角，这是一种观察到的作为新型显示器技术的基础现象。下图显示了一个可调焦液体透镜，其曲率半径可以通过电润湿效应进行调节。颜色显示透镜的下层油填充部分中的流速大小，箭头图显示上层液体中的流速。



随着流体的长度尺度接近于分子间长度尺度，更加复杂的动力学效应变得重要起来。对于气体的分子平均自由程与流动几何尺寸之间的比例可由克努森数 (Knudsen, Kn) 来指定。很明显， Kn 的尺度为 1/L。如果 $Kn < 0.01$，流体流动通常可以由纳维 - 斯托克斯方程和无滑移边界条件进行描述。滑移流范畴 ($0.01 < Kn < 0.1$)，可以在纳维 - 斯托克斯方程中使用正确的滑动边界条件来描述从边界离开的流动。微流体模块包含一个专门的物理场接口来处理这

些轻微的稀薄气体流动：**滑移流**接口。对于高度稀薄气体流动，则需要使用**分子流模块**。

微流体模块物理场接口指南

微流体物理场接口用于设置仿真的问题。每个物理场接口通过一套偏微分或常微分方程，以及合适的边界条件和初始条件来表达对应的物理现象。向物理场接口添加的每个特征表示底层方程中的一个项或条件。这些特征通常关联到模型中的几何实体，例如求解域、边界、边 （对于三维组件）或点。图 1 使用层流混合器模型 （微流体模块的**案例库**）显示模型开发器及选定的**流体属性 1** 特征节点的设置窗口。这个节点添加纳维 - 斯托克斯方程到选定的域中进行仿真。在**流体属性**栏，其中的设置表明流体的密度和粘度继承自赋值给域的材料属性。这些材料属性可以设置为模型中因变量的函数，例如，温度和压力。模型树中还高亮显示壁、入口 、对称，以及出口边界条件。壁边界条件默认应用到所有模型中的表面，向流体添加无滑移约束。入口和出口特征中包含大量选项，表征流体进入或离开仿真域。

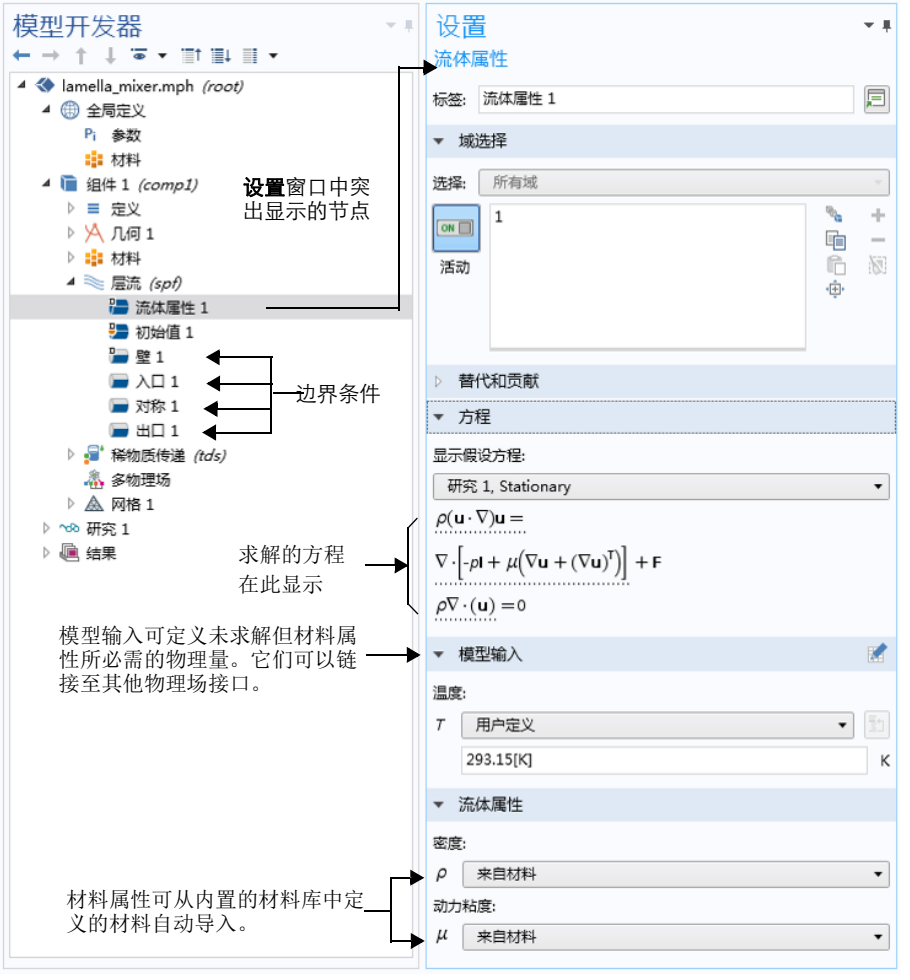


*图 1：**模型开发器**（左）和选定特征节点的流体属性 1 的**设置**窗口（右）。**设置**窗口的**方程**栏显示模型方程。通过特征添加到方程系统的项通过在下方的点线说明。*

微流体模块包含一组用于模拟不同类型的微流体装置的物理场接口。当开始创建新模型时，这些物理场接口可以从**模型向导**中选定。图 2 显示**微流体模块**中包含的带物理场接口的**模型向导**。您还可以参阅根据空间维度和研究类型排列的物理场接口，下面将对微流体模块中给定的物理场接口作一个简要的描述。

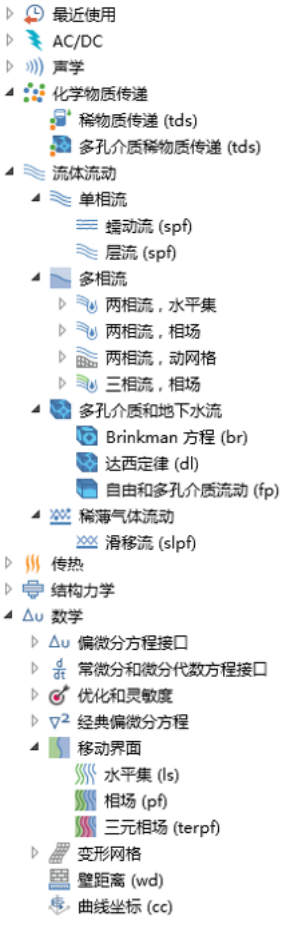


*图 2：**模型向导**中显示的**微流体模块**物理场接口。注：适用于三维组件。*

单相流

微流体流动通常雷诺数 (Re) 都较低，这个准数用来评价流体受到的粘性力和惯性力的比值，由下式给定：$Re=\rho UL/\mu$，其中 ρ 是流体密度， U 是特征速度，L 是特征长度， μ 是动力粘度。

层流接口 （）适用于雷诺数小于 1000 的情况。本物理场接口求解纳维 - 斯托克斯方程，包括不可压缩和弱可压缩流体 （后者表示马赫数 Ma 小于 0.3，马赫数由

下式给定 Ma=U/c，其中 c 为流体中的音速）。这个流体流动接口还可以用于模拟非牛顿流体。

蠕动流接口 （）近似处理纳维 - 斯托克斯方程，适用于雷诺数远小于 1 的情况，这也常常称为斯托克斯流，其中粘性流动占主导。这是微流体装置里面常用的接口。

多相流

两相流，水平集接口 （）、**两相流，相场**接口 （）以及**两相流，动网格**接口 （）用于对流体界面分离的两种流体建模。移动的界面可以分别通过使用水平集方法、相场方法或者动网格来进行跟踪。水平集和相场方法使用固定的网格，求解额外的方程来跟踪界面位置。动网格法在动网格中求解纳维 - 斯托克斯方程，使用边界条件来表征界面。在这种情况下，必须求解网格变形后的方程。因为动网格接口中的几何表面用来表征两种流体之间的界面，因此界面本身不能破裂成为断开的多个表面。这意味着动网格接口不能用于模拟诸如喷墨打印机中的液滴成型类型的问题 （在这种情况下，应当使用水平集或相场接口）。所有这三个物理场接口都支持可压缩 （马赫数， Ma<0.3）和不可压缩层流，其中一种或两种流体可以是非牛顿类型的流体。

层流三相流，相场接口 () 模拟不可压缩三相流的层流，可以是牛顿或非牛顿类型的流体。通过相场方法跟踪三相之间移动的流体 - 流体界面。

多孔介质和地下水流

Brinkman 方程接口 （）用于对通过多孔介质的流体进行建模，其中不能忽略剪切应力。本物理场接口支持 Stokes-Brinkman 方程，适用于很低速的流动，还可以考虑引入用于较高速度的 Forchheimer 作用力。其中的流体可以是不可压缩或可压缩，马赫数小于 0.3。

达西定律接口 （）用于对通过多孔介质的相对低速流进行建模，可以忽略垂直于流动的剪切应力。

自由和多孔介质流接口 （）用于对多孔介质 （使用 **Brinkman 方程**）和层流进行建模，并自动提供这两者之间的耦合。

这些物理场接口适用于多孔介质中的微流体。典型应用包括研究生物组织中的微流体。

稀物质传递

稀物质传递接口 （）用于模拟混合物通过扩散、对流 （与流体流动耦合）和电场中迁移产生的化学物质传递，其中某种成份 （溶剂）含量占主导 （超过 90 mol%）。它常用于对混合器的性能进行建模。如果需要对微流体装置中的化学反应进行建模，建议使用化学反应工程模块。

稀薄气体流动

当分子的平均自由程 λ 变得与流动的长度尺度 L 相当时，就会发生稀薄气体流动。我们可以使用克努森数 (Knudsen, Kn=λ/L) 来表征流体中的稀薄效应的重要性。随着气体变为稀薄 （对应于增加的 Kn），在近壁一个平均分子自由程距离出现的克努森层开始在流动中具有显著的效应。当克努森数小于 0.01 时，这种稀薄效应可以被忽略，可以使用无滑移边界条件的纳维 - 斯托克斯方程 （**层流** () 或**蠕动流**接口 ()）。对于轻微稀薄化的气体 (0.01<Kn<0.1)，可以在域中耦合连续介质纳维 - 斯托克斯方程和合适的壁边界条件表征克努森层。在这种情况下，推荐使用**滑移流**接口 （）。要对更大的克努森数建模，则需要**分子流模块**。下图显示了如何获得较高的克努森数，既可以减少几何尺寸，也可以减少气体的压力或数密度。

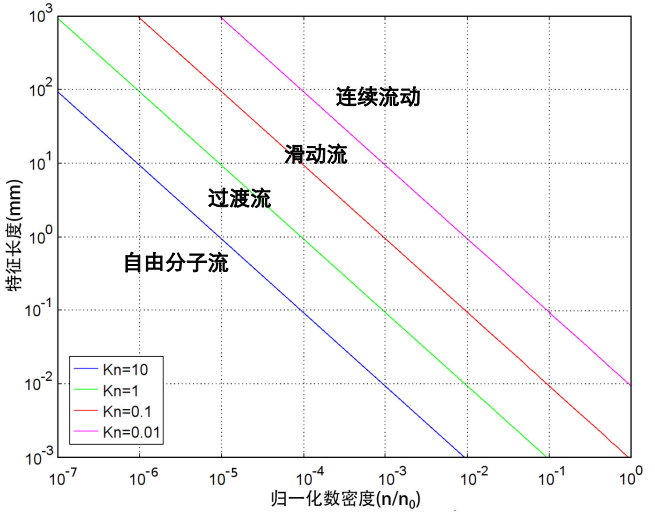


图 3：绘图显示稀薄气体流动的主要流体流动范畴。不同的范畴通过表示常数克努森数的直线隔开。气体的数密度通过在 0° C (n0) 和一个大气压环境中的理想气体的数密度进行归一化。

根据空间维度和研究类型排列的物理场接口

下表列出了 COMSOL Multiphysics 基本许可证提供的物理场接口和特定于此模块的物理场接口。

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
化学物质传递				
稀物质传递[1]		tds	所有维度	稳态；瞬态
多孔介质稀物质传递		tds	所有维度	稳态；瞬态
反应流				
层流，稀物质[1]		—	三维，二维，二维轴对称	稳态；瞬态

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
流体流动				
单相流				
蠕动流		spf	三维，二维，二维轴对称	稳态；瞬态
层流 [1]		spf	三维，二维，二维轴对称	稳态；瞬态
多相流				
两相流，水平集				
层流两相流，水平集		—	三维，二维，二维轴对称	带相初始化的瞬态
两相流，相场				
层流两相流，相场		—	三维，二维，二维轴对称	带相初始化的瞬态
三相流，相场				
层流三相流，相场		—	三维，二维	瞬态
两相流，动网格				
层流两相流，动网格		—	三维，二维，二维轴对称	瞬态
多孔介质和地下水流				
Brinkman 方程		br	三维，二维，二维轴对称	稳态；瞬态

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
达西定律		dl	所有维度	稳态；瞬态
自由和多孔介质流动		fp	三维，二维，二维轴对称	稳态；瞬态
稀薄气体流动				
滑移流		slpf	三维，二维，二维轴对称	稳态；瞬态
数学				
移动界面				
水平集		ls	所有维度	带相初始化的瞬态
相场		pf	所有维度	瞬态；带相初始化的瞬态
三元相场		terpf	三维，二维，二维轴对称	瞬态

[1] 此物理场接口随核心 COMSOL 包一起提供，并添加了针对此模块的功能。

教学示例：可控扩散微型混合器[1]

本例处理一个 H 型微流体装置，通过扩散进行可控的混合。装置中引入两个不同的层流，在可控的时间段内接触。接触表面很清晰，通过控制流速，可以控制物质通过扩散从一种流体传递到另一种流体中的量。这种装置的概念如图 4 所示。这种设计用于当两种流体 A 和 B 接触时保持层流状态，防止出现不可控的对流混合。流体 A 和 B 之间的物质传递只能通过扩散，这样可以保证扩散系数小的物质保持在各自的流体中。

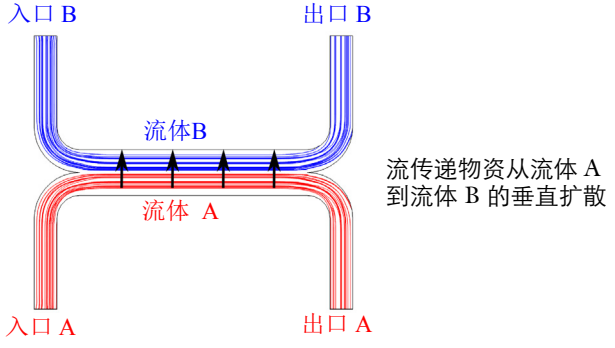


图 4：装置的概念图

入口流速接近 0.1 mm/s，因此专门用来表征流动特征的雷诺数为：

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho U L}{\mu} = 0.001$$

其中 ρ 是流体密度 (1000 kg/m^3)，U 是流体的特征速度 (0.1 mm/s)，μ 是流体的粘度(1 mPa·s)，以及 L 是装置的特征长度 (10 mm)。当雷诺数远远低于 1 时，如本例，可以使用蠕动流。将纳维 - 斯托克斯方程中的对流项去掉，得到不可压缩斯托克斯方程为：

1. 本例由西雅图的华盛顿大学 Bruce Finlayson 教授指导的 Albert Witarsa 提供原始模型，这是毕业生课程的一部分，作业目标包括使用数学建模来评估微流体领域潜在的专利。

$$\nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) = 0$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

其中 **u** 是流体速度 (m/s)， p 为压力 (Pa)。

在装置中混合涉及到的物质浓度相对于溶剂很低，本例中溶剂为水。这意味着溶质分子只能与水分子相互作用，可以使用 Fick 定律来描述扩散现象。因此得到溶质的质量守恒方程：

$$-\nabla \cdot (-D\nabla c + c\mathbf{u}) = 0$$

其中 D 是溶质的扩散系数 （m^2/s）， c 是浓度 （mol/m^3）。扩散流动可以使用另一个无量纲数表征：Peclet 数，由下式给定:

$$\mathrm{Pe} = \frac{LU}{D}$$

本例中，使用参数化求解器来求解方程 1 对三种不同物质的结果，每种物质具有不同的扩散系数 D: 1×10^{-11}1 m^2/s，5×10^{-11} m^2/s 及 1×10^{-10} m^2/s。这些 D 的值对应的 Peclet 数分别是 100、 20 和 10。因为这些 Peclet 数都大于 1，意味着单元 Peclet 数远远大于 1，当求解 Fick 方程时需要采用数值稳定方法。 COMSOL 自动默认包含稳定算法，因此不需要显式地设置。

本例求解两种不同版本：

- 第一个版本，假设溶质浓度的变化不影响流体的密度和粘度。这意味着可以分两步求解，首先求解纳维 - 斯托克斯方程，然后求解质量守恒方程。
- 第二个版本，粘度依赖于浓度发生变化

$$\mu = \mu_0(1 + \alpha c^2)$$

其中 α 是一个常数，单位为 $m^6/(mol)^2$，μ_0 是零浓度时的粘度。这种浓度和粘度之间的关系常见于大分子溶液。

装置的几何见图 5，因为具有对称性，所以可以分解为两个部分。这种设计目标是当两种不同流体 A 和 B 接触在一起时保持层流状态，这样可以防止不可控的对流混合。流体 A 和 B 之间的物质传递只能通过扩散进行，使得小扩散系数的物质保留在各自的流体中。

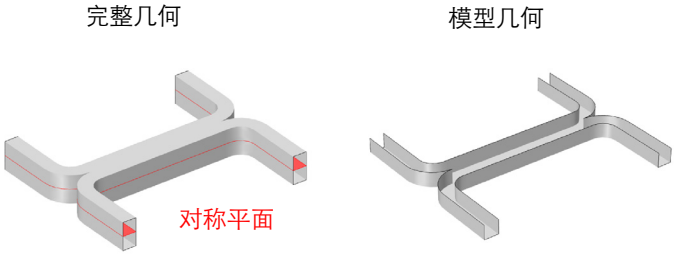


图 5：左：装置的几何显示存在对称面。右：模型几何，只需模拟装置的一半，因为流体沿着中面对称。

模型向导

注：这些操作说明基于 Windows 用户界面，但同样适用于 Linux 和 Mac，只是略有差别。

1 在桌面上双击 COMSOL 图标打开软件。当软件打开时，您可以选择使用**模型向导**来新建一个 COMSOL 模型，或使用**空模型**来手动创建。对于本教程，请单击**模型向导**按钮。

如果 COMSOL 已经打开，您可以通过从**文件**菜单选择**新建**，然后单击**模型向导**。

模型向导会引导您完成设置模型的最初几个步骤。下面的窗口让您选择建模的空间维度。

2 在**选择空间维度**窗口，单击**三维**按钮。

3 在**选择物理场**树的**流体流动** > **单相流**下单击**蠕动流 (spf)**。

4 单击**添加**。

5 在**选择物理场**树的**化学物质传递**下单击**稀物质传递 (tds)**。

6 单击**添加**，然后单击**研究**按钮。

7 在**一般研究**树下单击**稳态**。

8 单击**完成**。

几何 1

对于很多微流体装置，使用微米作为几何尺寸的单位更加方便。因为装置具有对称性，因此只需要模拟其中一半。

1 在**模型开发器**的**组件**下单击**几何 1** 。

2 在**几何**的**设置**窗口，找到**单位**栏。从**长度单位**列表中选择 μm。

几何可以通过从一个二维工作平面上的几何拉伸得到。首先在工作平面上绘制一个俯视图。

3 在**几何**工具栏上单击**工作平面** 。

矩形 1

1 在**模型开发器**的**几何 1**> **工作平面 1** 下右键单击**平面几何** ，然后选择**矩形**。

2 在**矩形**的**设置**窗口找到**大小**栏。

- 在**宽度**文本框中输入 140。
- 在**高度**文本框中输入 60。

3 单击**构建选定对象**按钮 。

矩形 2

1 右键单击**平面几何** ，然后选择**矩形**。

2 在**矩形**的**设置**窗口找到**大小**栏。

- 在**宽度**文本框中输入 120。
- 在**高度**文本框中输入 50。

3 找到**位置**栏。

- 在 **xw** 文本框输入 10。
- 在 **yw** 文本框输入 10。

4 单击**构建选定对象**按钮 。

差集 1

1 右键单击**平面几何** ，然后选择**布尔操作和分割** > **差集**。

2 仅选择对象 r1。

3 在**差集**的设置窗口找到**差集**栏，打开**要减去的对象**的激活按钮 。

4 仅选择对象 r2。

5 单击**构建选定对象**按钮 。

圆角 1

1 右键单击**平面几何** ，然后选择**圆角**。

2 在对象 dif1 中仅选择点 3 和 5。

3 在**圆角**的**设置**窗口找到**半径**栏，在**半径**文本框中键入 10。

4 单击**构建选定对象**按钮 。

圆角 2

1 右键单击**平面几何** ，然后选择**圆角**。

2 在对象 fil1 上仅选择点 1 和 9。

3 在**圆角**的**设置**窗口找到**半径**栏，在**半径**文本框中键入 20。

4 单击**构建选定对象**按钮 。

镜像 1

1 右键单击**平面几何** ，然后选择**变换** > **镜像**。

2 仅选择对象 fil2。

3 在**镜像**的**设置**窗口找到**输入**栏，勾选**保留输入对象**复选框。

4 找到**反射线法矢**栏。

- 在 **xw** 文本框输入 0。
- 在 **yw** 文本框输入 1。

5 单击**构建选定对象**按钮 。

并集 1

1 右键单击**平面几何** ，然后选择**布尔操作和分割** > **并集** 。

2 仅选择对象 fil2 和 mir1。

3 单击**构建选定对象**按钮 。

拉伸 1

将二维几何拉伸得到三维几何。

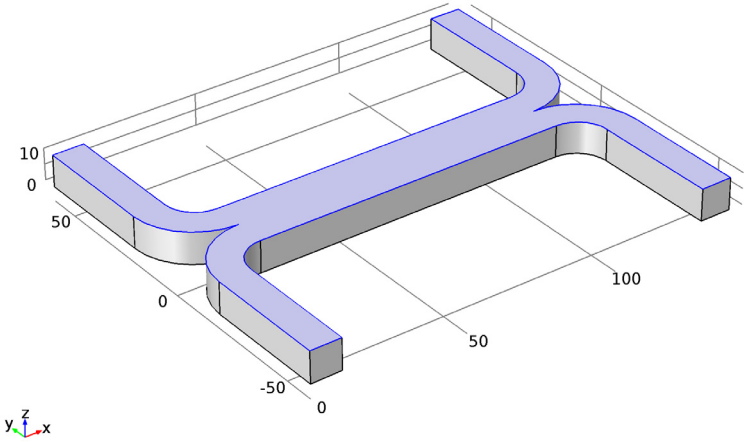
1 右键单击**工作平面 1**，然后选择**拉伸**。

2 在**拉伸**的**设置**窗口，进入**到面的距离**栏。

3 在表中输入以下设置：

距离 (μm)
10

4 单击**构建选定对象**按钮 。



全局定义

参数

1 在**主屏幕**工具栏上单击**参数** Pi 并选择**参数 1** Pi 。

注：在 Linux 和 Mac 下，主屏幕工具栏是指 Desktop 顶部附近的一组特定控件。

2 在**参数**的**设置**窗口找到**参数**栏。

3 在表中输入以下设置：

名称	表达式	描述
D	5e-11[m^2/s]	扩散常数
fr	15[pl/s]	入口流速
c0	1[mol/m^3]	入口浓度
alpha	0.5[(m^3/mol)^2]	粘度 c^2- 项前因数

材料

向模型添加材料属性。

材料 1

1 在**材料**工具栏单击**空材料** 。

2 在**材料**的**设置**窗口找到**材料属性明细**栏。

3 在表中输入以下设置：

属性	名称	值
密度	rho	1000
动力粘度	mu	1e-3

蠕动流

注：选择几何实体有几种方法。例如，要选择边界，将光标放在图形窗口的边界上。如果所需边界未以红色突出显示，则转动鼠标滚轮直至该边界突出显示，然后单击左键进行选择（也可以使用向上和向下箭头键代替滚轮）。另外，也可以使用**选择列表**来显示可选边界的编号列表（如果使用 Windows，则可从**主屏幕**> **窗口**菜单中获取，在其他平台上，可从**窗口**菜单中获取）。要将边界添加到选择中，首先单击该边界，然后右键单击并选择**添加到选择**。要添加多个边界，在单击时按住 Ctrl 键。有关在图形窗口中选择几何实体的更多信息，请参阅 *COMSOL Multiphysics Reference Manual*。

1 在**模型开发器**的**组件 1** 下单击**蠕动流** 。

注：模型树中会自动添加一些默认的节点，在节点 左上角的 ‘D’ 表示这是一个默认的节点。

入口 1

添加一个充分发展的流动入口边界条件。

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**入口**。

2 仅选择**边界 2**。

3 在**入口**的**设置**窗口找到**边界条件**栏，从**边界条件**列表中选择**充分发展的流动**。

4 找到**充分发展的流动**栏，单击**流速**按钮。

- 在 *V*0 文本框中输入 `fr/2`。

  流速设置为参数值的一半，因为我们只模拟了一半几何。

入口 2

1 在**蠕动流**下右键单击**入口 1** ，然后选择**生成副本** 。

2 在**入口**的**设置**窗口找到**边界选择**栏，单击**清除选择** 。

3 仅选择**边界 10**。

出口 1

添加压力出口边界条件。

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**出口**。

2 仅选择**边界 23** 和 **25**。

默认压力为 0 Pa，适用于本例。

对称 1

在对称平面添加对称边界条件。

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**对称**。

2 仅选择**边界 4** 和 **9**。

接下来设置质量传递物理场特征。

传递属性 1

使用计算得到的速度用于物质传递的对流项。

1 在**模型开发器**展开**组件 1**> **稀物质传递**节点，然后选择**传递属性 1**。

2 在**传递属性**的**设置**窗口找到**模型输入**栏，从 **u** 列表中选择**速度场 (spf)**。

扩散系数设置为使用之前定义的参数。

3 找到**扩散**栏，在 ***D*c** 文本框中键入 D。

浓度 1

指定两个入口的浓度。

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**浓度**。

2 仅选择**边界 2**。

3 在**浓度**的**设置**窗口找到**浓度**栏，勾选**物质 c** 复选框。

4 在 $c_{0,c}$ 文本框中输入 c0。

浓度 2

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**浓度**。

2 仅选择**边界 10**。

3 在**浓度**的**设置**窗口找到**浓度**栏，勾选**物质 c** 复选框。

在这个边界上，浓度取默认值为 0。

流出 1

使用流出条件使得物质以对流形式离开求解域。

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**流出**。

2 单击**粘贴选择** 。

3 在**粘贴选择**对话框的**选择**文本框中键入 23。

4 单击**确定**。

流出 2

1 在**物理场**工具栏单击**边界** ，然后选择**流出**。
2 单击**粘贴选择** 。
3 在**粘贴选择**对话框的**选择**文本框中键入 25。
4 单击**确定**。

网格 1

设置网格。默认情况下， COMSOL 将为模型中的当前物理场创建网格。通常这已足够，但在本例中，我们希望对默认网格序列进行一些小编辑。默认情况下，内部边界上不使用细化网格。由于内部边界对流体流动而言是透明的，一般而言应该如此。然而，在本例中，两个流体的混合发生在靠近内部边界的位置，因此我们可以将边界 16 添加到**大小 1** 以及**边界层属性 1** 网格特征。

大小

1 在**模型开发器**窗口的**组件 1** 下，右键单击**网格 1** ，并选择**编辑物理场引导的序列**。
2 在**大小**的**设置**窗口找到**单元大小**栏。
3 从**预定义**下拉列表中选择**超粗化**。

大小 1

1 在**模型开发器**窗口的**组件 1 (comp1)** > **网格 1** 下，单击**大小 1**。
2 在**大小**的**设置**窗口找到**单元大小**栏。
3 从**预定义**列表中选择**粗化**。
4 定位到**几何实体选择**栏。单击**粘贴选择** 。
5 在**粘贴选择**对话框的**选择**文本框中键入 16。
6 单击**确定**。

边界层属性 1

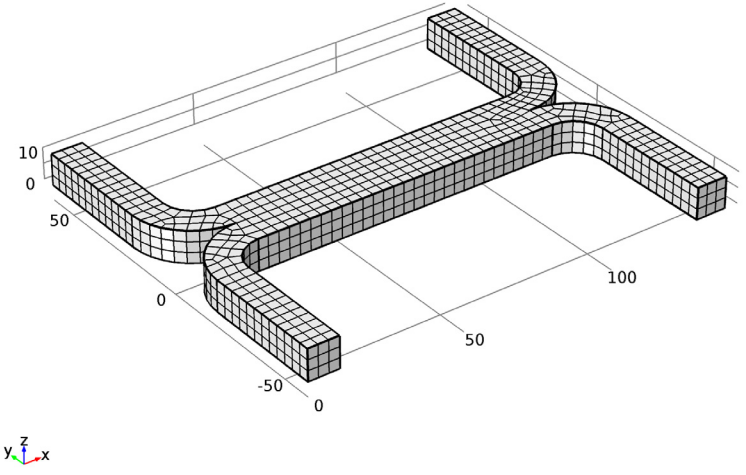
1 在**模型开发器**窗口中，展开**组件 1 (comp1)** > **网格 1**> **边界层 1** 节点，然后单击**边界层属性 1** 。
2 在**边界层属性 1** 的**设置**窗口中，找到**边界选择**栏。

3 单击**粘贴选择** 。

4 在**粘贴选择**对话框的**选择**文本框中键入 16。

5 单击**确定**。

6 右键单击 **组件 1 (comp1) >网格1>边界层 1>边界层属性 1** 并选择**全部构建** 。



研究 1

现在设置一个研究来求解问题。首先假设流体流动和扩散问题为不耦合。在这种情况下，可以首先求解流体流动问题，然后使用流速作为输入值来求解扩散问题。这将节约大量的时间和内存，特别是因为这里的扩散问题求解三个不同参数的情况。

1 在**模型开发器**单击**研究 1** 。

2 在**研究**的**设置**窗口找到**研究设置**栏，清除**生成默认绘图**复选框。

因为研究将自动地生成很多默认图，所以禁用默认绘图。

对于步骤 1，只求解蠕动流问题。

步骤 1：稳态

1 在**模型开发器**的**研究 1** 下单击**步骤 1：稳态** 。

2 在**稳态**的**设置**窗口的**物理场和变量选择**栏单击**物理场接口**列的**稀物质传递**行。

3 在表中，单击**求解**列，并将选择标记 修改为选择标记 ，从研究中移除该物理场。

添加另一个研究步骤。

步骤 2：稳态 2

1 在**研究**工具栏单击**研究步骤** ，然后选择**稳态** > **稳态** 。

在这个步骤中禁用求解蠕动流，但是将前一个求解步骤计算得到的解导入作为对应的因变量，以便用于计算对流物质传递。

2 在**稳态**的**设置**窗口中的**物理场和变量选择**栏的**物理场接口**列选择**蠕动流**行。

3 在表中，单击**求解**列并将选择标记 改为清除选择标记 ，从研究步骤中删除这个物理场接口。

4 单击展开**因变量值**栏。

- 在**不求解的变量值**区域中，从设置列表中选择**用户控制**。
- 从**方法**列表中选择**解**。
- 从**研究**列表中选择**研究 1，稳态**。

对于三个不同的扩散系数分别求解扩散问题。

5 在**稳态**的设置窗口单击展开**研究扩展**栏，勾选**辅助扫描**复选框。

6 单击**添加** 。

7 在表中输入以下设置：

连续参数	参数值列表
D （扩散常数）	1e-10 5e-11 1e-11

8 在**主屏幕**工具栏单击**计算** 。

结果

数据集

创建一个表面数据集，用于查看流道壁上的压力。

1 在**结果**工具栏单击**更多数据集**，然后选择**表面**。

2 在**表面**的**设置**窗口找到**选择**栏，单击**粘贴选择**。

3 在**粘贴选择**对话框的选择文本框中键入
1,3,5,6,7,11,12,13,14,15,17,18,19,20,21,22,24,26,27。

4 单击**确定**。

三维绘图组 1

首先绘制流道中的流速分布。

1 在**主屏幕**工具栏单击**添加绘图组**，然后选择**三维绘图组**。

使用切面图来查看几何中一个或多个切面上的数据。

2 在**模型开发器**右键单击**三维绘图组 1**，然后选择**切面**。

3 在**切面**的设置窗口找到**表达式**栏，从**单位**列表中选择 **mm/s**。

在不同方向添加其他切面。

4 右键单击**三维绘图组 1**，然后选择**切面**。

5 在**切面**的**设置**窗口找到**表达式**栏，从**单位**列表中选择 **mm/s**。

6 找到**平面数据**栏。

- 从**平面**列表中选择 **xy- 平面**。
- 在**平面**文本框中键入 1。

添加的切面应当使用与已有速度切面图相同的尺度和颜色。

7 单击展开**继承样式**栏，从**绘图**列表中选择**切面 1**。

为了避免标题重复，对已添加的切面图关闭标题。

8 单击展开**标题**栏，从**标题类型**列表中选择**无**。

接下来添加第三个平面的切面。

9 在**三维绘图组 1** 下右键单击**切面 2**，然后选择**生成副本**。

10 在**切面**的**设置**窗口找到**平面数据**栏。

- 从**平面**列表中选择 **zx- 平面**。
- 在**平面**文本框中输入 2。

使用箭头图来可视化流动方向。

11 右键单击**三维绘图组 1**，然后选择**体箭头**。

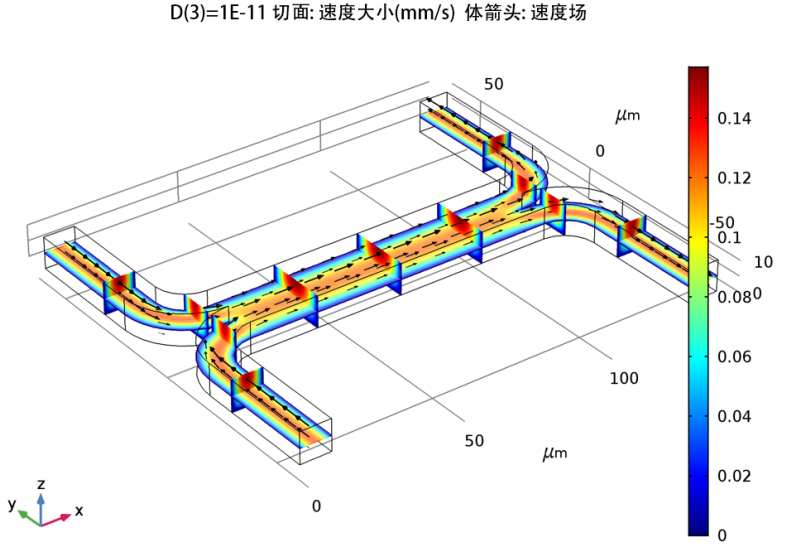
12 在**体箭头**的**设置**窗口找到**箭头位置**栏。

- 找到 **x 栅格点**子栏，在**点**文本框中输入 14。
- 找到 **y 栅格点**子栏，在**点**文本框中输入 21。
- 找到 **z 栅格点**子栏，在**点**文本框中输入 3。

13 找到**着色和样式**栏，从**颜色**列表中选择**黑色**。

14 单击**三维绘图组 1**，在**标签**文本框中输入**速度 （不耦合流动）**。

15 在**三维绘图组 1** 工具栏上单击**绘制** 。



接下来使用之前创建的数据集添加一个压力图。

三维绘图组 2

1 在**主屏幕**工具箱单击**添加绘图组** ，然后选择**三维绘图组** 。

2 在**三维绘图组**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**表面 1**。

添加单个颜色的表面来高亮表示流道壁。

3 右键单击**三维绘图组 2** ，然后选择**表面** 。

4 在**表面**的**设置**窗口找到**表达式**栏，在**表达式**文本框中键入 1。

5 找到**着色和样式**栏。

- 从**着色**列表中选择**均匀**。
- 从**颜色**列表中选择**灰色**。

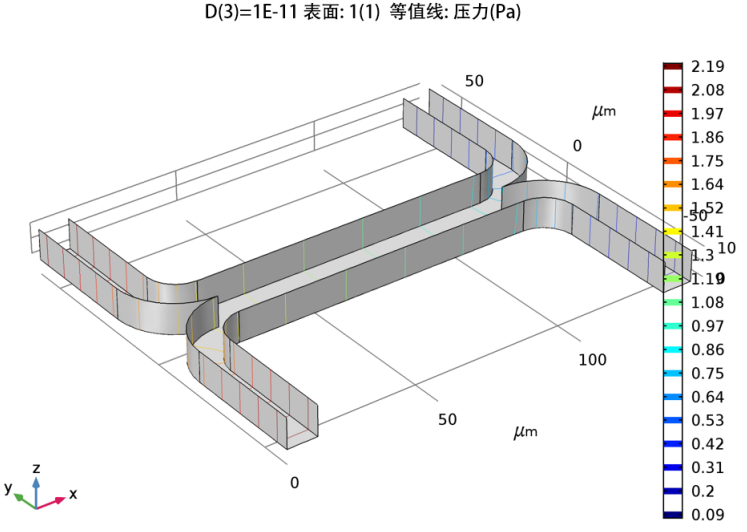
接下来使用等值线来可视化压力。

6 右键单击**三维绘图组 2**，然后选择**等值线**。

7 在**等值线**的设置窗口的**表达式**栏右上角单击**替换表达式**，从菜单中选择**蠕动流 > p − 压力**。

8 单击**三维绘图组 2**，在**标签**文本框中键入**压力 （不耦合流动）**。

9 单击**绘制**。



接下来创建一个切面图来可视化装置中的浓度，使用已经做好的速度切面图作为基础。

速度 （不耦合流动） 1

1 在**模型开发器**的**结果**中右键单击**速度 （不耦合流动）**，然后选择**生成副本**。

2 在**标签**文本框中输入**浓度 （不耦合流动）**。

3 单击**绘制**。

将每个切面子节点中绘制的物理量修改为浓度。

浓度 （不耦合流动）

1 展开**结果** > **浓度 （不耦合流动）**节点，然后单击**切面 1** 。

2 在**切面**的**设置**窗口单击**表达式**栏右上角的**替换表达式** ，从菜单中选择**稀物质传递** > **c – 浓度**。

3 单击**切面 2** 。

4 在**切面**的**设置**窗口单击**表达式**栏右上角的**替换表达式** ，从菜单中选择 **c – 浓度**。

5 对**切面 3** 重复步骤 3 和 4。

禁用箭头图。

6 右键单击**体箭头 1** ，然后选择**禁用** 。

7 在**三维绘图组**工具栏上单击**绘制** 。

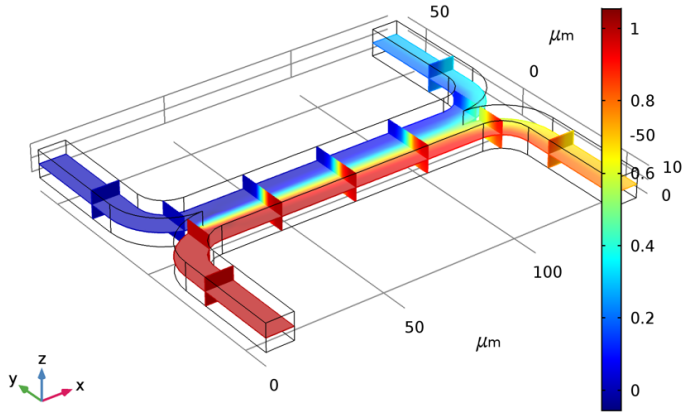
分别查看三种不同扩散系数水平的结果图。

8 单击**浓度 （不耦合流动）** 。

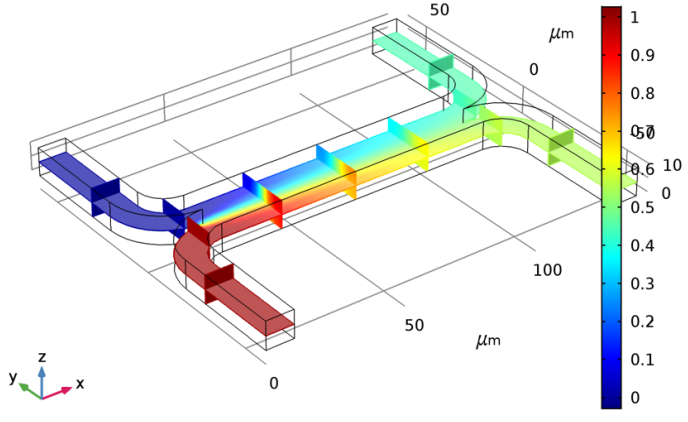
9 在**三维绘图组**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**参数值 (D)** 列表选择每个参数值：1e-11、 5e-11 和 1e-10，然后在每次选择后分别单击**绘制**按钮 。

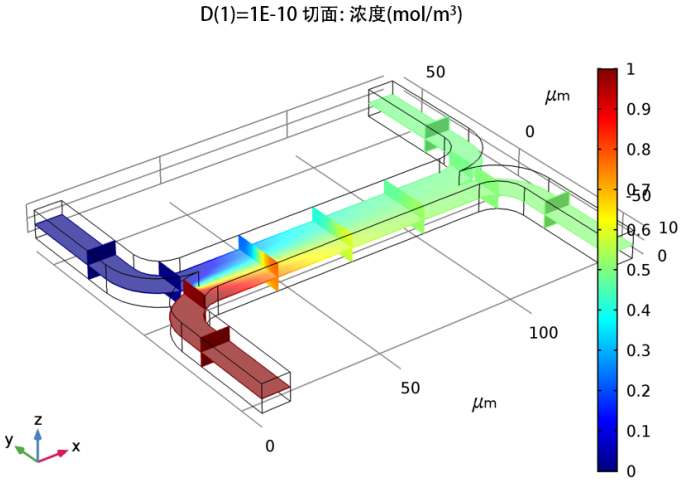
下页的图分别显示三种不同扩散系数的结果。对于最重的物质，具有最小的扩散系数，在流体 A 和 B 之间的混合最小。对于最轻的物质，具有最大的扩散系数，混合效果接近完美。

D(3)=1E-11 切面: 浓度(mol/m³)



D(2)=5E-11 切面: 浓度(mol/m³)





添加一个全局图来显示出口的浓度随扩散系数的差异。

一维绘图组 4

1 在**主屏幕**工具栏上单击**添加绘图组**，然后选择**一维绘图组**。

2 在**一维绘图组**工具栏单击**全局**。

使用之前定义的平均算子来计算装置出口处的平均浓度。

3 在**全局**的**设置**窗口中，单击 **y 轴数据**栏右上角的**替换表达式**。从菜单中选择**组件 1> 稀物质传递 >tds.out2.c0_avg_c - 浓度**。

4 找到 **x 轴数据**栏。在**参数**下，选择**表达式**并在**表达式**文本框中键入 **D**。

5 单击展开**图例**栏。清除**显示图标**复选框 （本绘图不需要任何图例，因为只绘制一个物理量）。

在计算的数据点上添加标记。

6 单击并展开**着色和样式**栏，找到**线标记**栏。

- 从**标记**下拉列表中选择**点**。
- 从**定位**下拉列表中选择**数据点中**。

更改坐标轴标题。

注：在轴和绘图标题中可以输入 HTML 标签和很多数学符号，以及希腊字母。请参阅 *COMSOL Multiphysics Reference Manual* 中 “Results Evaluation and Visualization”一节的 “Using Special Formats and Symbols in Titles”，了解更多信息。

7 在**模型开发器**中单击**一维绘图组 4** ∿。

8 在**一维绘图组**的**设置**窗口找到**绘图设置**栏。

- 勾选 **x- 轴标签**复选框，在后面关联的文本框中输入**扩散系数**（`m<sup>2</sup>/s`）。
- 勾选 **y- 轴标签**复选框，在后面关联的文本框中输入**流体 B 出口处浓度**（`mol/m<sup>3</sup>`）。

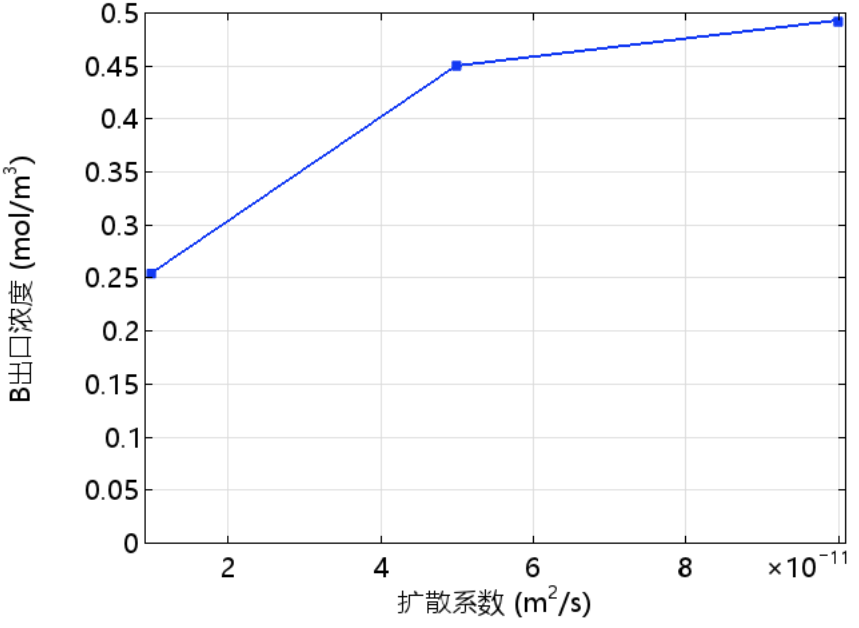
修改绘图中的轴限制。

9 单击并展开**轴**栏，勾选**手动轴限制**复选框。

- 在 **y 最小值**文本框中输入 `0`。
- 在 **y 最大值**文本框中输入 `0.5`。

10 单击**一维绘图组 4** ∿，然后在**标签**文本框中键入**输出浓度（不耦合流动）**。

11 单击**绘制** 。



上图显示出口处的物质浓度强烈依赖于分子的扩散系数，因此这个装置可以用来分离具有不同扩散系数的物质，特别是如果将多个这样的装置级联成具有多个级数的情况。

在很多情况下，特别是如果溶液中包含大分子，溶解的物质对液体的粘度会有很大的影响。在这种情况下，纳维 - 斯托克斯方程和对流 - 扩散方程完全耦合，因此它们必须同时求解。

蠕动流

现在让我们设置全耦合分析。为了将粘度表达为随物质浓度变化的函数，可以很方便地在流体属性节点的粘度设置中键入表达式。

流体属性 1

1 在**模型开发器**的**蠕动流**下单击**流体属性 1** 。

2 在**流体属性**的**设置**窗口找到**流体属性**栏。

3 从 m 列表中选择**用户定义**，在关联的文本框中键入 `1e-3[Pa*s]*(1+alpha*c^2)`。

研究 2

添加一个研究来求解全耦合问题，在这种情况下，只求解其中一种扩散系数，因此不需要参数化扫描。模型默认使用在参数节点中输入的参数，扩散系数为：$5\times10^{-11}\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$。

1 在**主屏幕**工具栏单击**添加研究**。

2 找到**研究**子栏，在**一般研究**树中单击**稳态**。

3 在**添加研究**窗口单击**添加研究**。

仍然关闭默认的绘图。

4 在**模型开发器**单击**研究 2**。

5 在**研究**的**设置**窗口找到**研究设置**栏，清除**生成默认绘图**复选框。

6 在**主屏幕**工具栏单击**计算**。

结果

添加另一个指向新解的表面数据集。

数据集

1 在**模型开发器**的**结果** > **数据集**下右键单击**表面 1**，然后选择**生成副本**。

2 在**表面**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**研究 2／解 3**。

对全耦合问题重新创建速度、压力，以及浓度分布结果图。

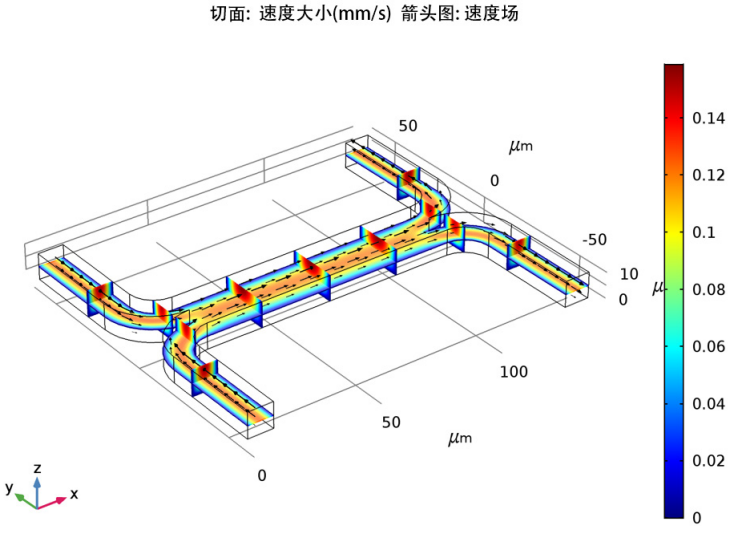
速度 （不耦合流动） 1

1 在**模型开发器**的**结果**节点下，右键单击**速度 （不耦合流动）**，然后选择**生成副本**。

2 在**三维绘图组**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**研究 2／解 3**。

3 在**标签**文本框中输入**速度 （耦合流动）**。

4 在**三维绘图组**工具栏单击**绘制** 。



流动图案显示出显著的差异，尽管将这个图与之间的图进行比较时很难看出来。后面我们将对流道中某个切面进行细致的研究，更清楚地高亮显示出差异。

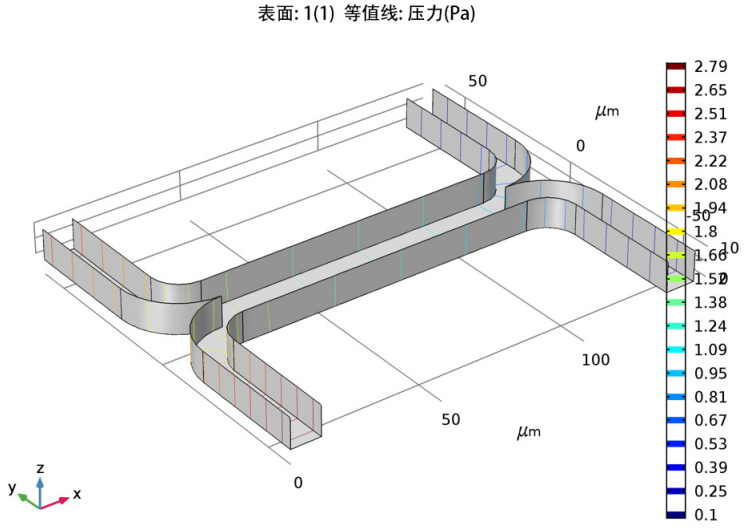
压力 （不耦合流动） 1

1 在**模型开发器**的**结果**节点下，右键单击**压力 （不耦合流动）** ，然后选择**生成副本** 。

2 在**三维绘图组**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**表面 2**。

3 在**标签**文本框中键入**压力 （耦合流动）**。

4 在**三维绘图组**工具栏上单击**绘制** 。



由于流体的粘度随着物质增长，流道壁上的压力分布也有明显的变化。因此两个入口必须保持不同的压力。这对于单个装置而言是可以实现的，但对于设计多级装置则会带来很大的复杂性。

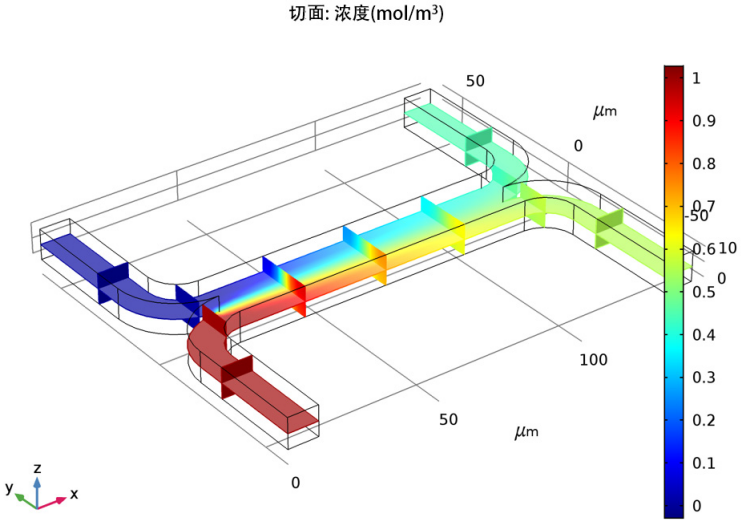
浓度 （不耦合流动） 1

1 在**模型开发器**的**结果**节点下右键单击**浓度 （不耦合流动）**，然后选择**生成副本**。

2 在**三维绘图组**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**研究 2／ 解 3**。

3 在**标签**文本框中输入**浓度 （耦合流动）**。

4 在**三维绘图组**工具栏上单击**绘制**。



浓度分布受到流动和浓度之间耦合的影响较小。

接下来在流道中央添加非耦合和耦合这两种不同情况的截面数据集。这将用来图形化显示由于耦合产生的流动分布的变化。

数据集

1 在**结果**工具栏上单击**截面**。

2 在**截面**的**设置**窗口找到**平面数据**栏，在 **x- 坐标**文本框中输入 70。

3 在**数据集**下右键单击**截面 1**，然后选择**生成副本**。

4 在**截面**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**研究 2／解 3**。

添加一个二维速度大小的等值线图。

二维绘图组 8

1 在**结果**工具栏上单击**二维绘图组**。

2 在**二维绘图组**的**设置**窗口找到**数据**栏。

- 从**数据集**列表中选择**截面 1**。
- 从**参数值 (D)** 列表中选择 5e-11。

3 右键单击**二维绘图组 8**，然后选择**等值线**。

4 在**等值线**的**设置**窗口找到**水平**栏，在**总水平数**文本框中输入 5。

创建一个等值线图的副本，使用相同的颜色和尺度，但是显示耦合结果。

5 在**二维绘图组 8** 下右键单击**等值线 1**，然后选择**生成副本**。

6 在**等值线**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集**列表中选择**截面 2**。

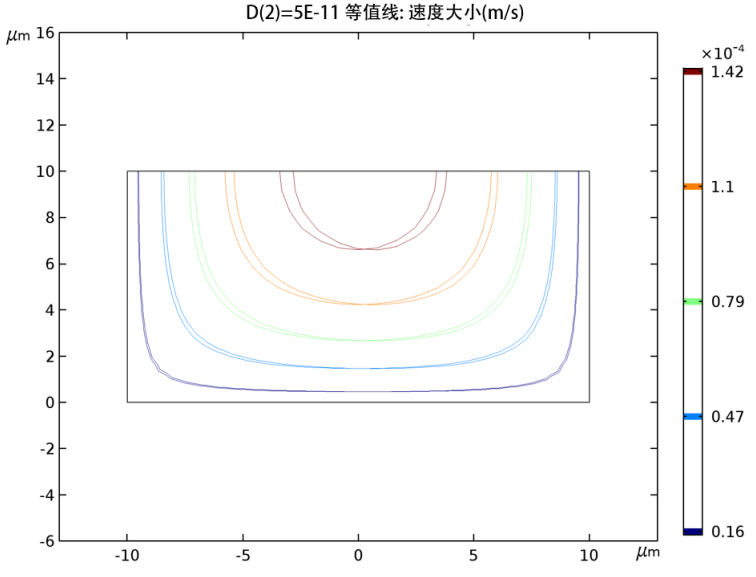
7 单击展开**标题**栏，从**标题类型**列表中选择无。

8 单击展开**继承样式**栏，从**绘图列表**中选择**等值线 1**。

9 单击**二维绘图组 8**。

10 在**标签**的文本框中输入**速度比较**。

11 在**二维绘图组**工具栏上单击**绘制**。



现在可以更详细地比较速度分布的差异了。很明显，耦合引入了非对称的流动模式，这是由于包含溶解物质的流体具有更高的粘度。

最后我们来比较一下不同溶液之间的出口浓度。

派生值

1 在**结果**工具栏的**派生值**区，选择**全局计算** 8.5。

2 在**全局计算**的**设置**窗口中，单击**表达式**栏右上角的**替换表达式**。从菜单中选择**组件 1> 稀物质传递 >tds.out2.c0_avg_c - 浓度**。

3 单击**计算**按钮 =。

当扩散系数为 5×10^{-11} m^2/s 时，出口的平均浓度为 0.448 mol/m^2。

4 在**派生值**下右键单击**全局计算 1** 8.5，然后选择**生成副本**。

5 在**全局计算**的**设置**窗口找到**数据**栏，从**数据集列表**中选择**研究 2／解 3**。

6 右键单击**全局计算 2** 8.5，然后选择**计算> 新表格**。

对于全耦合问题，扩散系数 D=5×10^{-11} m^2/s 的平均出口浓度为 0.4497 mol/m^3。

耦合与非耦合情况下出口浓度的差异并不明显，然而耦合会使得添加装置的级联更加困难，因为需要在两个入口使用不同压力来确保流体的入口速度相同。