Introduzione a COMSOL Multiphysics

Serena Morigi

Dipartimento di Matematica-CIRAM
Università degli Studi di Bologna

COMSOL Multiphysics

- Strumento software per la soluzione di problemi 1D,2D e 3D descritti da modelli di Equazioni a Derivate Parziali + condizioni al bordo/iniziali.

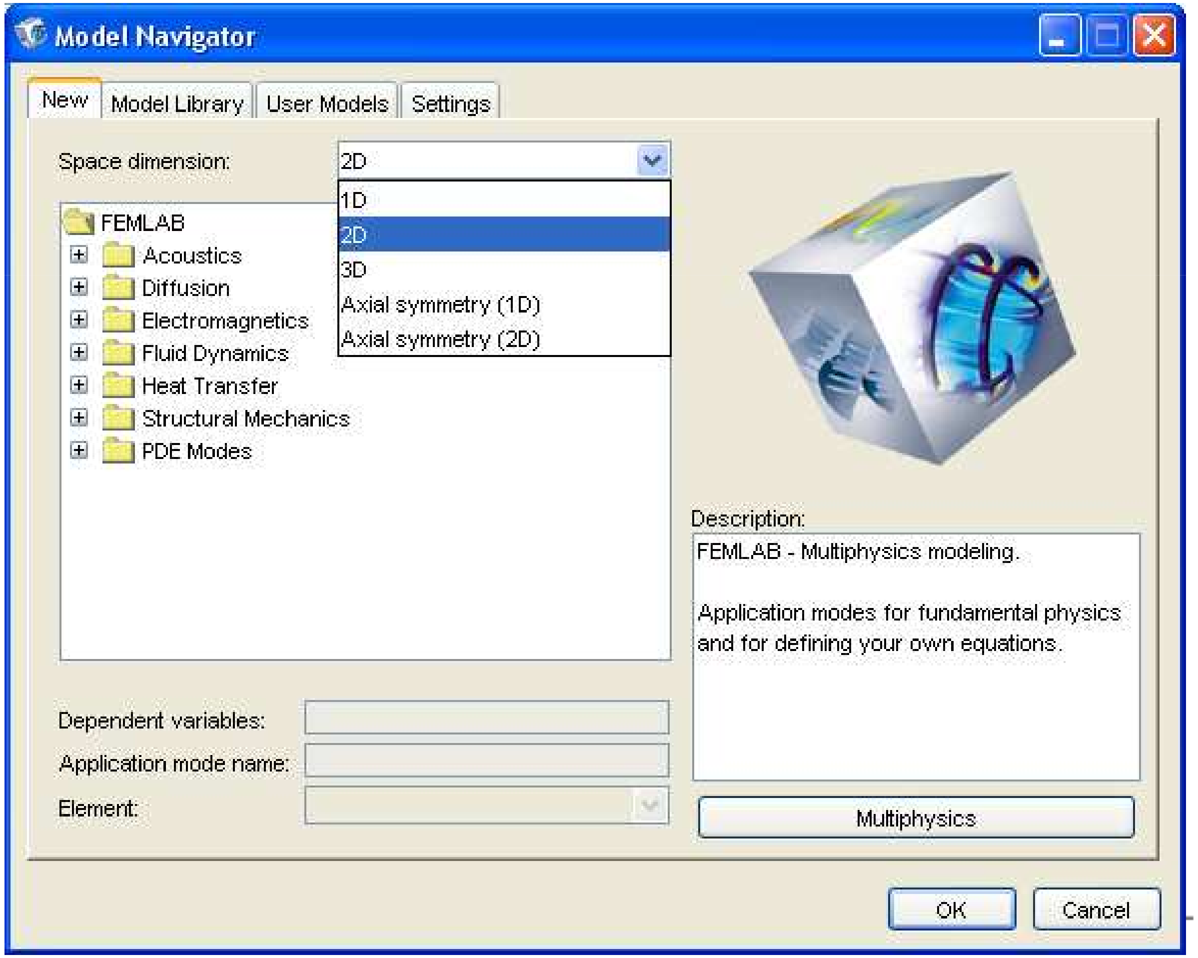
- Per la discretizzazione del problema si adotta il metodo agli Elementi Finiti (FEM)
- Il sw può essere utilizzato sia in modalità interattiva sia accedendo alle singole funzioni da linea comando MATLAB, sia mediante script COMSOL/MATLAB.
- Tramite l'ambiente grafico è possibile utilizzare i numerosi modelli predisposti per i principali campi di applicazione.

Model Navigator

- Finestra di dialogo usata per definire i parametri di una sessione di lavoro Femlab **(PDE Modes)**

New è usato per definire un nuovo problema.

Model Library è usato per esplorare problemi già risolti in COMSOL.



Model Library

Contiene esempi di problemi già risolti nei vari campi applicativi:

- Acustica
- Chimica
- Diffusione
- Elettromagnetismo
- Fluido Dinamica
- Conduzione di Calore
- Meccanica Strutturale
- Propagazione delle onde
- ....

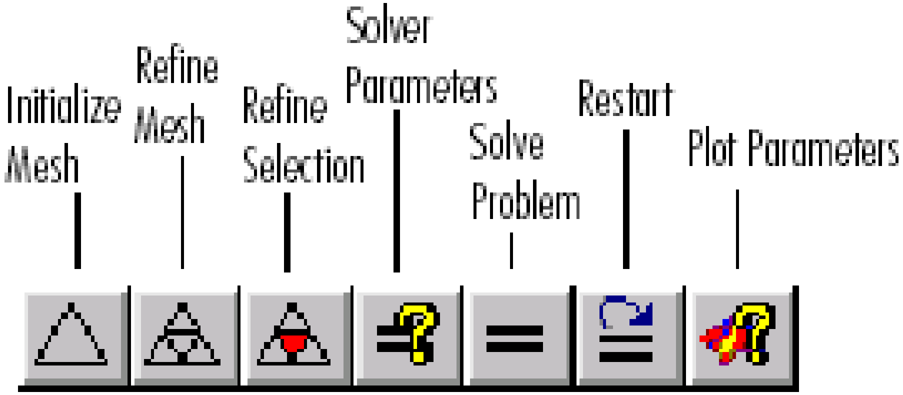
Come risolvere un modello PDE con COMSOL

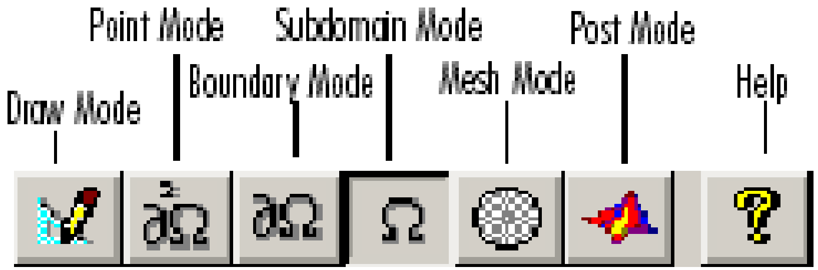
1. **Definizione del problema (classe di equazioni)**
2. **Definire la geometria 2D/3D del dominio (DRAW MODE)**
3. **Definire le condizioni al contorno/iniziali (BOUNDARY MODE)**
4. **Definire il modello o i coefficienti della PDE (SUBDOMAIN MODE)**

   specificare i coefficienti della PDE. E' possibile specificare una diversa PDE per ogni sottodomio, rendendo in questo modo possibile specificare per esempio differenti proprietà del materiale in un modello PDE; questa modalità permette inoltre l'inserimento di condizioni iniziali per un problema time-dependent.
5. **Discretizzazione del dominio (MESH MODE)**
6. **Risolvere la PDE (SOLVE MODE)**
7. **Visualizzare la soluzione ed altre proprietà fisiche calcolate dalla soluzione (POST MODE)**

   possibilità di visualizzazione diversi grafici, mesh, contorni, superfici e , per problemi parabolici ed iperbolici, le relative animazioni della soluzione che cambia nel tempo.

- Ad ogni modalità corrisponde anche un’icona sulla finestra principale di COMSOL





PDE Modes

Modelli di PDE possono essere dati nelle seguenti 3 forme:

1) forma dei coefficienti,
2) forma generale,
3) forma debole

PDE Modes: Forma dei Coefficienti

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c\nabla u + \alpha u - \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \qquad in\, \Omega$$

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot (c\nabla u + \alpha u - \gamma) + qu = g - h^T \mu \\ hu = r \end{aligned}\right\} \quad in\, \partial\Omega$$

boundary

Dominio di interesse Ω , la prima equazione è la PDE, la seconda e la terza rappresentano le condizioni di Neumann (o miste) e Dirichlet rispettivamente sul contorno.

h,c,r,q,g,f sono vettori e matrici nel caso di sistemi di PDE

PDE Modes: Forma dei Coefficienti

- PDE stazionaria (Steady-State Equation)

$$\cancel{e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t}} - \nabla \cdot (c \nabla u + \alpha u - \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \qquad in\ \Omega$$

Esempio: Equazione di Poisson

$$-\nabla \cdot \nabla u = 1 \quad in\ \Omega \quad u = 0 \quad in\ \partial\Omega$$

Implica c=f=h=1 e tutti gli altri coefficienti sono 0.

- PDE che dipende dal tempo

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c \nabla u + \alpha u - \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \qquad in\ \Omega$$

- **Equazioni ellittiche:** $-\nabla\cdot(c\nabla u)+au=f \quad in \quad \Omega$
  non lineari
  $$-\nabla\cdot(c(u)\nabla u)+a(u)u=f(u) \quad in \quad \Omega$$
- **Equazioni paraboliche** $d\frac{\partial u}{\partial t}-\nabla\cdot(c\nabla u)+au=f \quad in \quad \Omega$
- **Equazioni iperboliche** $d\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\nabla\cdot(c\nabla u)+au=f \quad in \quad \Omega$
- **Problema agli autovalori** $-\nabla\cdot(c\nabla u)+au=\lambda du \quad in \quad \Omega$
  Si possono anche gestire sistemi di dimensioni arbitrarie, esempio sistema di dimensione 2:

$$-\nabla\cdot(c_{11}\nabla u_1)-\nabla\cdot(c_{12}\nabla u_2)+a_{11}u_1+a_{12}u_2=f_1 \quad in \quad \Omega$$
$$-\nabla\cdot(c_{21}\nabla u_1)-\nabla\cdot(c_{22}\nabla u_2)+a_{21}u_1+a_{22}u_2=f_2 \quad in \quad \Omega$$

- **Condizioni al contorno per funzioni incognite scalari u**
  Dirichlet e Neumann e miste:h,c,u,r,q,g saranno vettori e matrici nel caso di un sistema di 2 equazioni

Forma dei Coefficienti: Interpretazione

diffusion

source

absorption

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (c\nabla u + \alpha u - \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f$$

mass

damped mass

convection

convection

source

PDE Modes: Forma Generale

Una formulazione più compatta

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = F \quad in\ \Omega$$

$$\left. \begin{aligned} -\mathbf{n} \cdot \Gamma &= G + \left(\frac{\partial R}{\partial u} \right)^T \mu \\ 0 &= R \end{aligned} \right\} \quad in\ \partial\Omega$$

boundary

Equazione di Poisson espressa in forma generale:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} -ux & -uy \end{bmatrix} \qquad F = 1$$

$$R = u.$$

Tutti gli altri coefficienti sono 0. (Notiamo: $\mu = -\mathbf{n} \cdot \Gamma$)

PDE Modes: Forma debole (Weak Form) (Stazionaria)

- Forma generale $$\nabla \cdot \Gamma = F$$
- Moltiplicare test function v e integrare

$$\int_{\Omega} v\nabla \cdot \Gamma dA = \int_{\Omega} vF dA$$

- Th. Divergenza e Integrazione per parti nella parte sx

$$\int_{\partial\Omega} (v\Gamma \cdot \mathbf{n}) ds - \int_{\Omega} (\nabla v \cdot \Gamma) dA = \int_{\Omega} vF dA$$

- Riscrivere

$$\boxed{0 = \int_{\Omega} (\nabla v \cdot \Gamma + vF) dA + \int_{\partial\Omega} (-v\Gamma \cdot \mathbf{n}) ds}$$

- Subdomain, weak: **`-ux_test*ux-uy_test*uy+u_test*F`** Boundary, constr: **`u`**

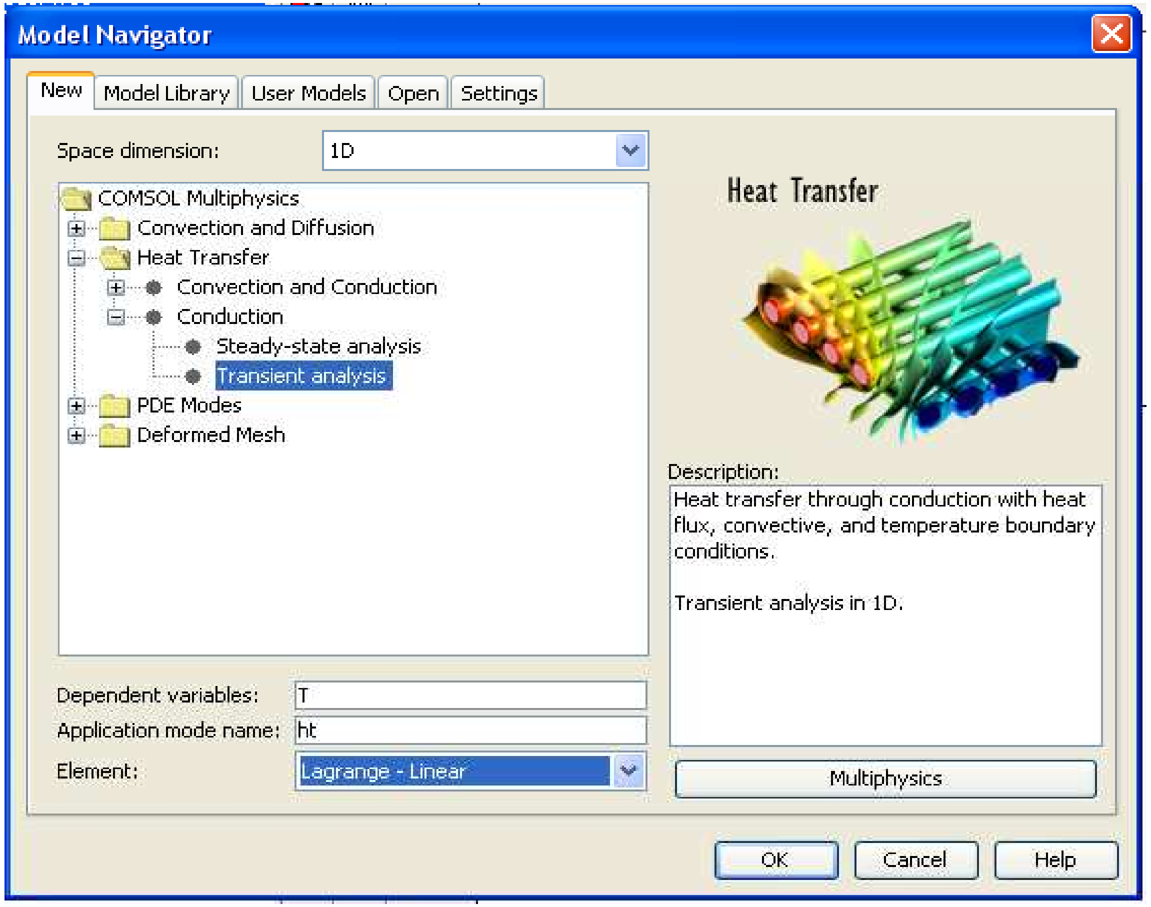
Esempio 1 Problema parabolico 1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x}\left(\left(1+x^2\right)\frac{\partial u}{\partial x}\right); \quad -1 < x < 1, \quad 0 \le t \le 0.2$$

$$u(x,0) = 100\left(1-|x|\right),$$

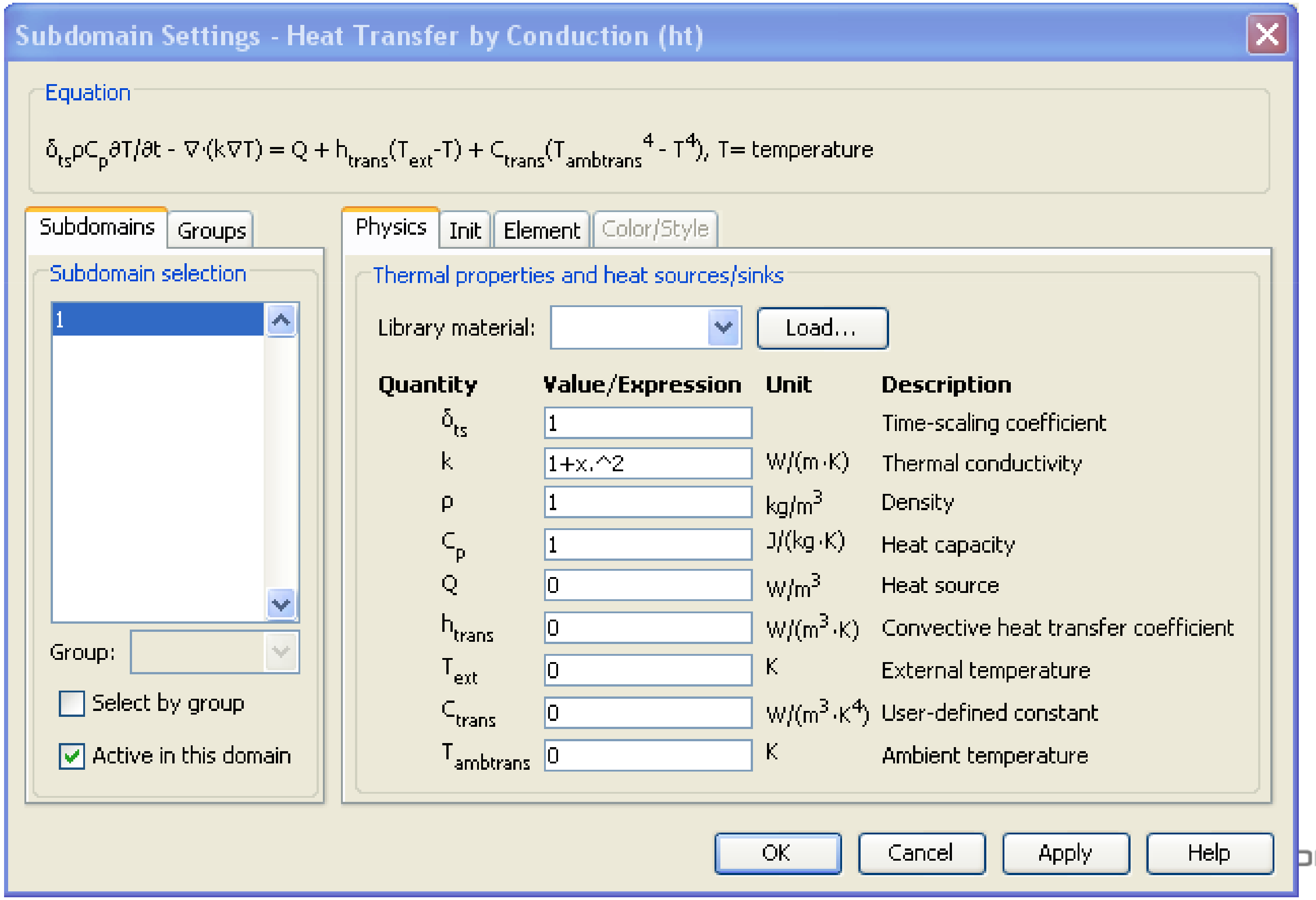
$$\begin{cases} u(-1,t) = 0 \\ u(1,t) = 0 \end{cases},$$

- **Scelta del modello:**

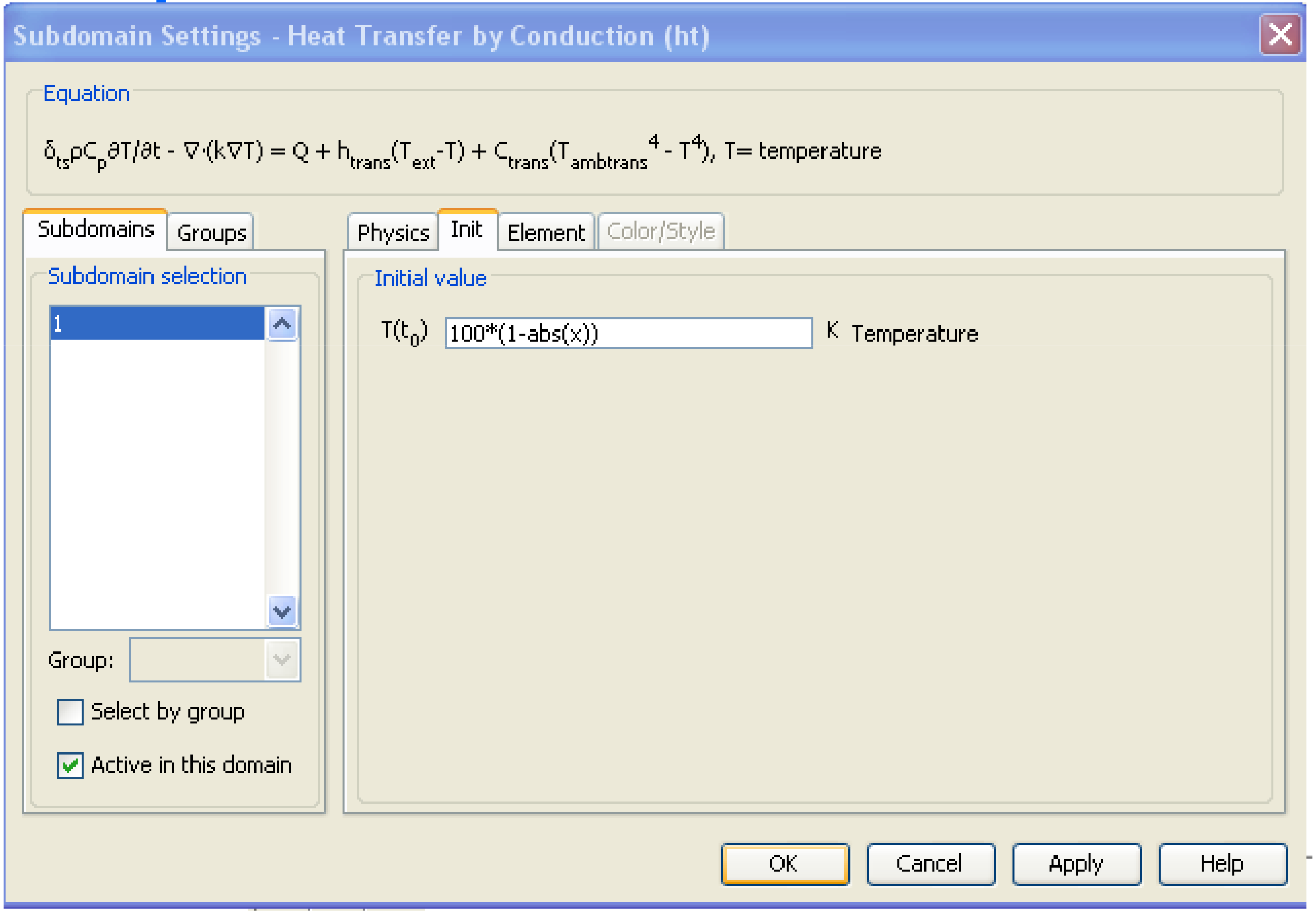


Esempio 1

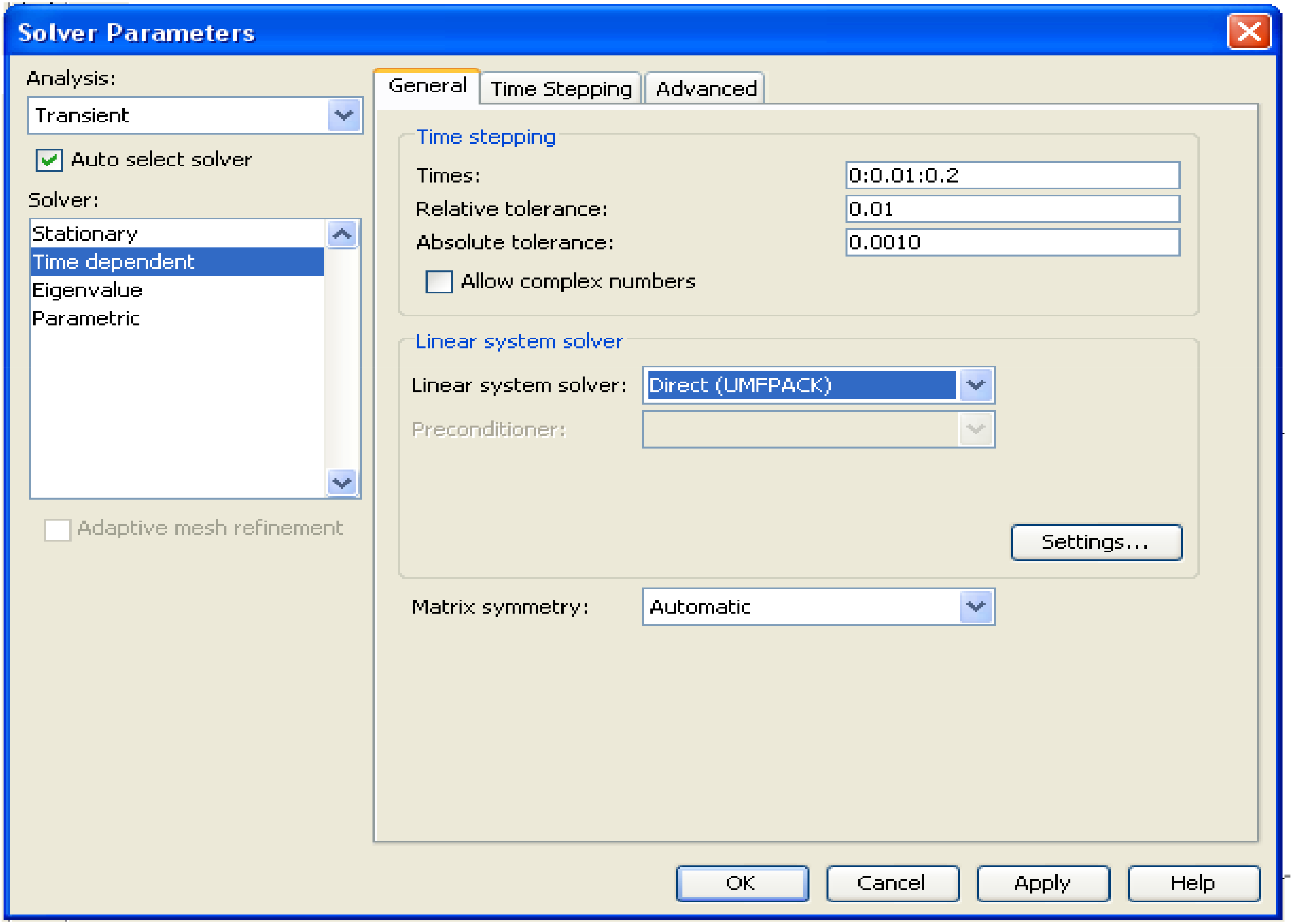
1. Draw MODE
2. Physics: Boundary
3. Physics: Subdomain



Esempio 1


Subdomain Settings - Heat Transfer by Conduction (ht)
Equation
δtsρCp∂T/∂t - ∇·(k∇T) = Q + htrans(Text-T) + Ctrans(Tambtrans4 - T4), T= temperature
Subdomains
Groups
Subdomain selection
1
Group:
Select by group
Active in this domain
Physics
Init
Element
Color/Style
Initial value
T(t0)
100*(1-abs(x))
K
Temperature
OK
Cancel
Apply
Help

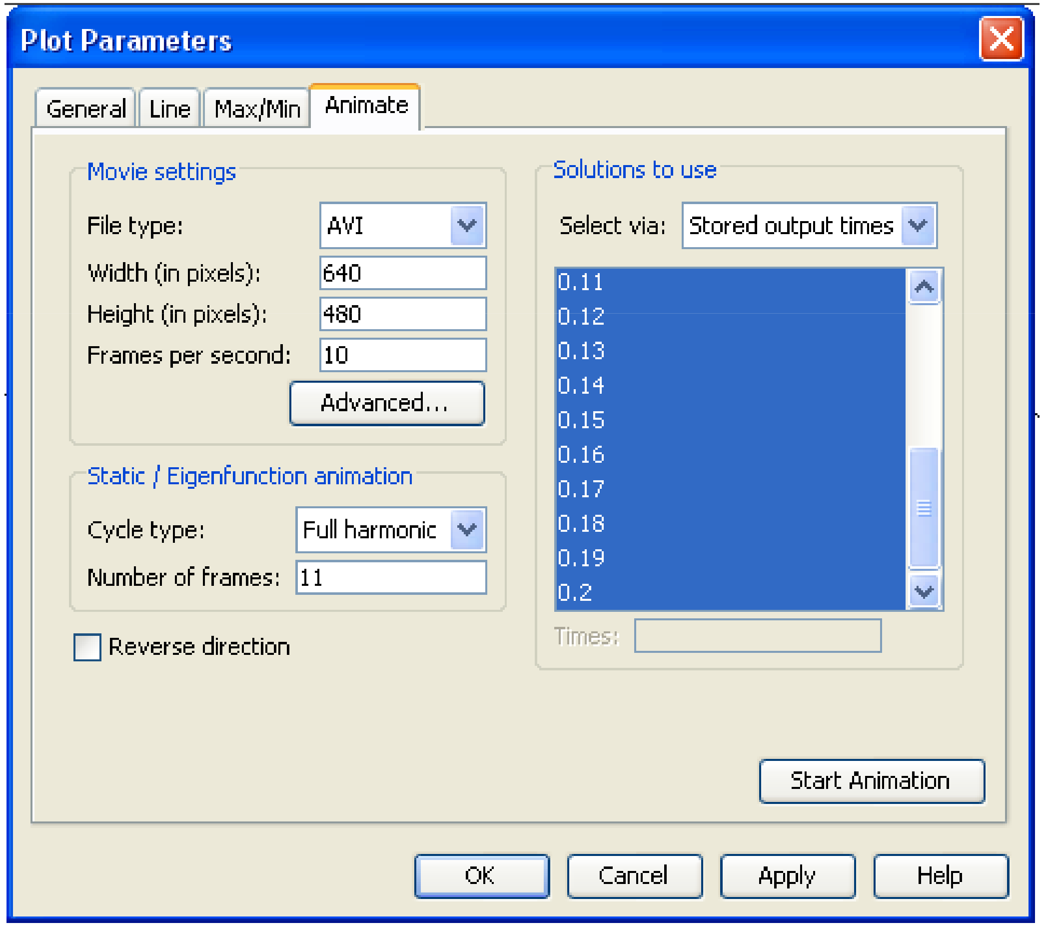
Esempio 1 Solve/Sover Parameters



4.Mesh MODE: Initialize Mesh

5.Solve

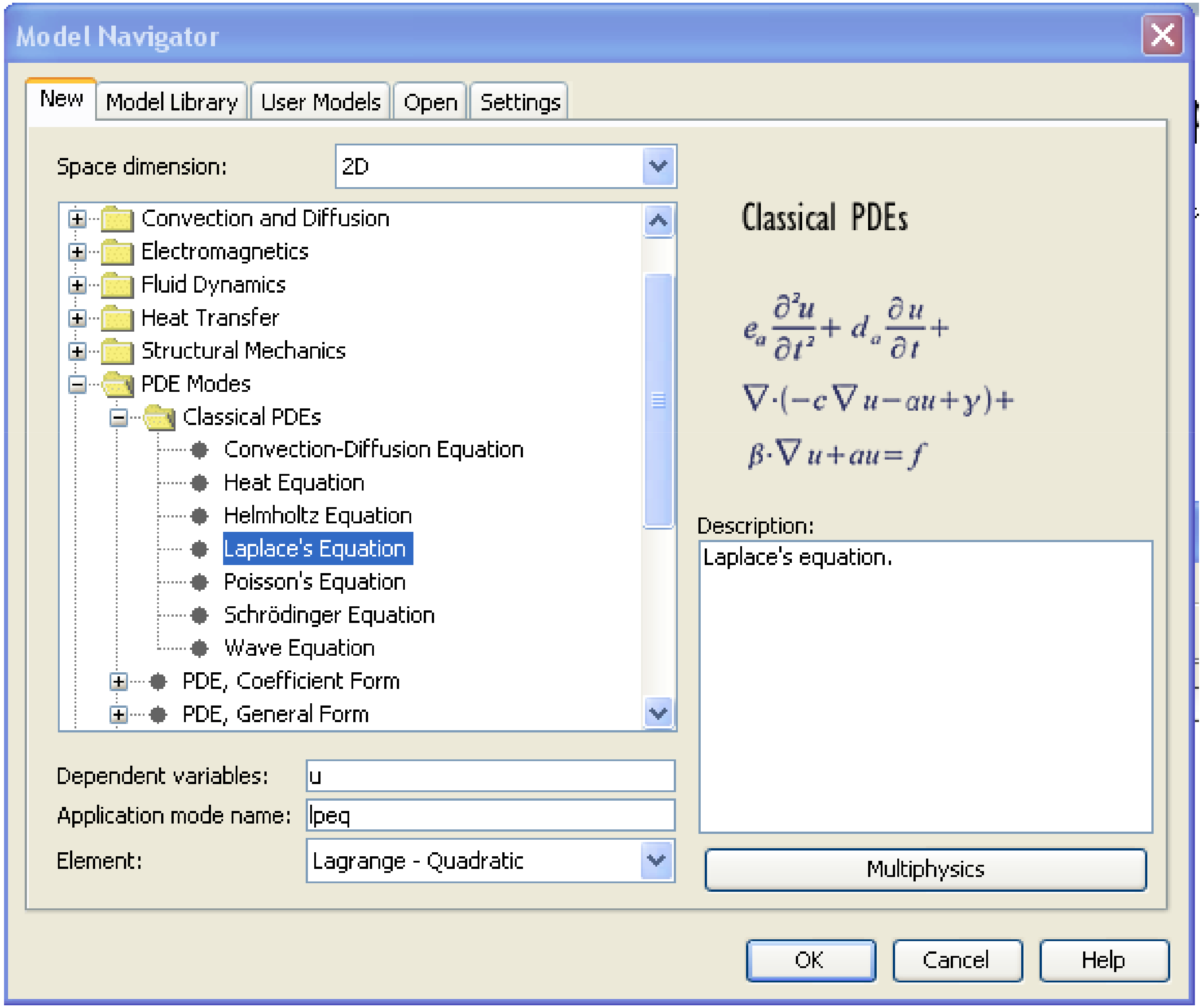
6.Grafico e Animazione della simulazione



7. File/Save as Ex1.m
8. Modificare manualmente per aggiungere un grafico e rieseguire:

```
X=fem.mesh.p;   % mesh discretization
XX=[X(1) X(3:end) X(2)]
sol=fem.sol.u;
S(1,:)=sol(1,:);N=size(sol,1);
S(2:N-1,:)=sol(3:N,:);
S(N,:)=sol(2,:);
T=fem.sol.tlist;  %time steps
[X,Y]=meshgrid(T,XX);
surf(X,Y,S)
xlabel('T');ylabel('x'),zlabel('u(x,t)')
figure
```

Esempio 2 Equazione di Laplace in 2D



1. Draw MODE

Dominio: rettangolo (x,y) = [0, 3] X [0, 1]

Nel menu **Options**, selezionare **Axis/Grid Settings**; poi porre il limite degli assi a [-1 4] e [-1 2]. Quindi, click Apply e OK sulla finestra del limite degli assi.

Nel menu **Draw**, selezionare **Rectangle/Square**. (non centrato)
Nella finestra di disegno, click e trascinare il cursore da (0,1) nel punto di coordinate (3,0). La regione apparirà in rosa e marcata R1.

2. Physics: Boundary MODE

u =+1 lungo i lati orizzontali e **u =-1** lungo quelli verticali.

Selezionare **Physics/Boundary settings**.

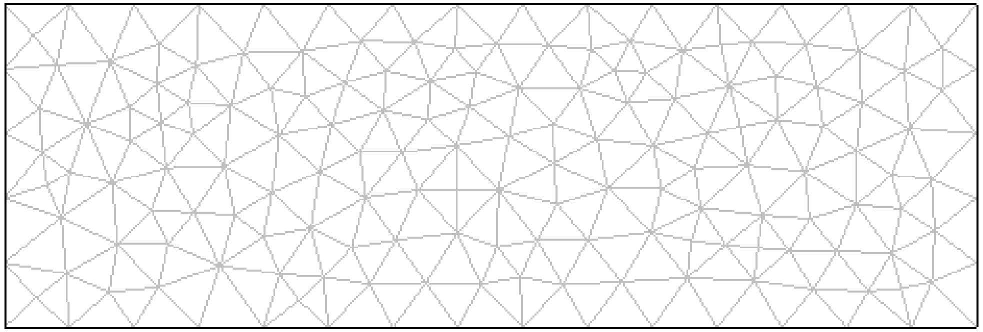
(ctrl +click mouse dx per selezione multipla dei lati)

3. Physics: Subdomain MODE

Nulla da fare poichè l'equazione è già impostata inizialmente in questo esempio

4. Mesh MODE

Generare la mesh: nel menu Mesh selezionare Initialize Mesh. Useremo questa volta la mesh di default.



5. Solve MODE:

Nel menu Solve, selezionare Solve Problem.

6. Postprocessing MODE:

Generare altri plots: nel menu **Postprocessing**, selezionare **Plot Parameters**; esplorare i differenti tipi di visualizzazione 2D e 3D. (es. Surface, Contour; per un grafic 3D cliccare la casella Height Data nella sottoscheda omonim della scheda Surface).

– Per migliorare l'accuratezza del plot, ritornare al menu **Mesh** e selezionare **Refine mesh**; poi nuovamente **Solve**; e si può chiaramente ripetere il raffinamento.

- Risolviamo ora un problema simile sullo stesso rettangolo ma con differenti condizioni al contorno. Torniamo al **Physics/Boundary Setting** mode Modificare le boundary conditions (coefficiente r).

  Lati verticali: *u=4*sin(pi*y).^2.*

  Lati orizzontali: in basso *u=-0.05 * x.^4 .* (3 - x).^2;*
  in alto *u=-.05*x.^2.*(3 - x).^4.*

  Poi risolvere e visualizzare avendo ora fissato i parametri di plot a contour, ed height in surface.

Salvataggio in uno script MATLAB

- E’ possible salvare il lavoro svolto in una sessione: File/Save As... Salvare ad esempio con il nome pdeintro.m

- Poi si può uscire da COMSOL, e riprendere in un secondo momento digitando pdeintro nel prompt di MATLAB

- Per creare una nuova sessione di lavoro e quindi un nuovo esempio selezionare File/New

Esercizio 1
Equazione di Poisson 2D, forma coefficienti

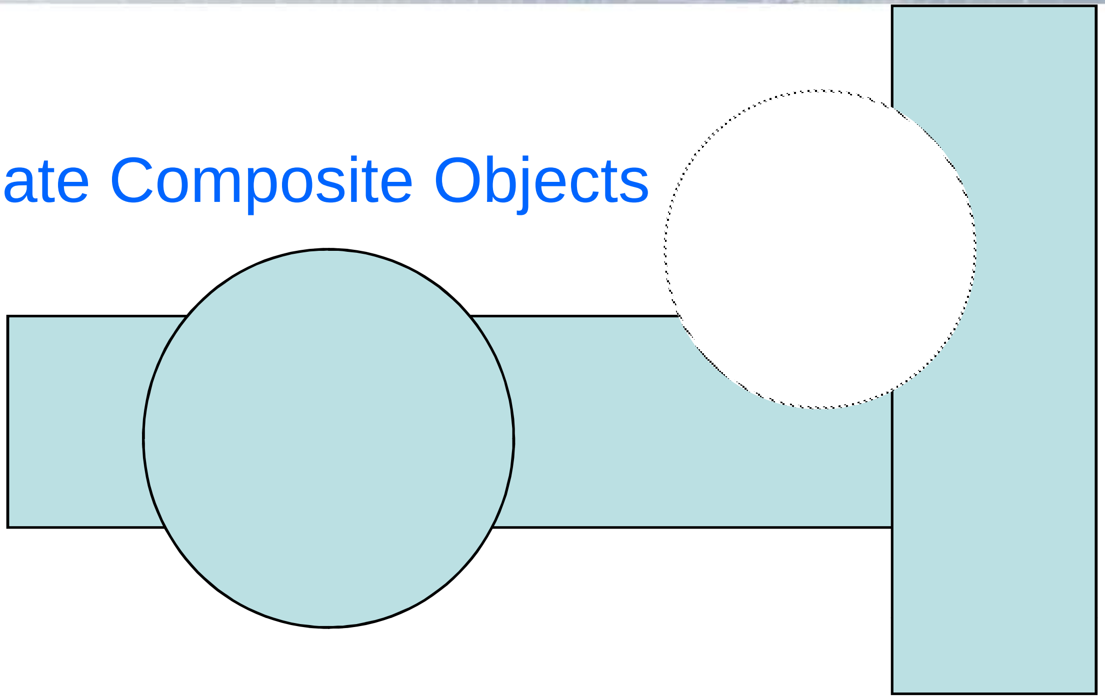
$$\boxed{-\nabla \cdot (c\nabla u) = f \qquad in\ \Omega}$$

- Inserire l'equazione a partire dalla forma coefficienti dando opportuni coefficienti. Dopo **File/New** nella finestra **Model Navigator** selezionare quindi **PDE Modes/Coefficient** ok.
- DRAW MODE

COMSOL utilizza il paradigma CSG (Constructive Solid Geometry) per la modellazione del dominio delle PDE. A partire quindi da semplici geometrie (cerchio, poligono, rettangolo, ellisse) alle quali vengono associati nomi unici, gli operatori +,*, e – permettono di comporre gli oggetti per ottenere il dominio dell'equazione.

Definire ora il seguente dominio formato dall'unione degli oggetti solidi meno gli oggetti delimitati da tratteggio.

Utilizzare
Draw/Create Composite Objects



- Rimuovere infine tutti i bordi dei sottodomini dalla figura risultante deselezionando **Keep internal border** nella finestra di **Create Composite Object**.

Boundary Settings MODE

- Condizioni al contorno di Neumann solo per gli archi di cerchio (q=0).

Subdomain Settings MODE

- Modificare i coefficienti della PDE da **Subdomain setting** (avendo prima selezionato tutto il dominio disegnato) in c=1, f=10, tutti gli altri parametri 0. Risolvere e visualizzare la soluzione.

Esercizio 2

Equazione ellittica sul cerchio in forma coefficienti

$$\boxed{\begin{array}{l} -\Delta u + 2u = 0 \quad su \quad \Omega, \quad u = e^{x+y} \quad su \quad \partial\Omega, \\ \Omega \text{ cerchio di centro l'origine e raggio 3} \end{array}}$$

- Soluzione analitica esatta $\boxed{u(x,y) = e^{x+y}}$
- Risolvere e visualizzare la soluzione analitica ed approssimata, e l'errore commesso nella soluzione approssimata per differenti raffinamenti della mesh.
- NOTA: per sovrapporre due plot anziche' sovrascrivere un plot pre-esistente, selezionare la voce **Keep current Plot** in **Parameter Plot.**

Esercizio 3

Problema di superficie minima equazione ellittica in forma generale

- L'area della superficie

$$\{z = u(x, y) / (x, y) \in \Omega\}$$

  è data da

$$A[u] = \int_{\Omega} \sqrt{1 + |\nabla u|^2}\, d\Omega$$

- Dati i valori della funzione u nel contorno determinare u dentro il dominio omega in modo tale che l'area sia minimizzata.

- Applicata l'equazione di Eulero-Lagrange si ottiene il modello per il problema di superifcie minima:

Esercizio 3

Problema di superficie minima equazione ellittica in forma generale

$$-\nabla \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{1+|\nabla u|^2}}\nabla u\right) = 0 \quad su \quad \Omega = \left\{(x,y) \mid x^2 + y^2 \le 1\right\},$$

$$u = x^2 \quad su \quad \partial\Omega,$$

- In questo caso il problema è non lineare e quindi deve essere risolto con un solutore non lineare. Attenzione: in Subdomain Setting, specificare Γ:

$$\Gamma = ss * \left[-ux \quad -uy\right]$$

- **Options** menu/ **Expressions/ Global Expressions** per definire la variabile ss valida ovunque nella sessione di lavoro

$$ss = 1./sqrt(ux.^2 + uy.^2)$$

- Risolvere e visualizzare la soluzione approssimata mediante l'ambiente COMSOL.

Esercizio 4

Equazione del calore (problema parabolico) in forma coefficienti

Problema della diffusione del calore all'interno di un corpo:

$$d\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0 \quad su \quad \Omega$$

$$u = 100 \quad \text{sul lato sinistro di} \quad \partial\Omega, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = -10 \quad \text{sul lato destro di} \quad \partial\Omega$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \quad \text{sugli altri lati di} \quad \partial\Omega$$

- Dominio: blocco di metallo rettangolare con una cavità rettangolare nel mezzo. La temperatura iniziale del blocco di metallo sia di zero gradi al momento iniziale t0 in cui si inizia ad applicare calore. Specificare le condizioni iniziali in **Subdomain Setting**.
- Studiare il comportamento del sistema nei primi 5 secondi di tempo. Selezionare Solve/Solver Parameters/times.
- Risolvere e visualizzare la dinamica della soluzione approssimata mediante il check box **Animate** in **Plot Parameter.**

Esercizio 5

L'equazione delle onde (problema iperbolico) in forma coefficienti (time dependent wave extension)

$$\boxed{\frac{\partial u^2}{\partial t^2} - \Delta u = 0 \quad su \quad \Omega}$$

- Dominio: quadrato di vertici (-1,-1),(-1,1),(1,-1), e (1,1).
- La membrana è fissata ai lati destro e sinistro (u=0), ed è invece libera ($\frac{\partial u}{\partial n} = 0$) nei lati in alto e in basso.
- Le condizioni inziali al tempo t=0, sono

$$u(0) = \arctan(\cos(\frac{\pi}{2}x)), \qquad \frac{\partial u(0)}{\partial t} = 3\sin(\pi x)e^{\sin(\frac{\pi}{2}y)}$$

- Risolvere in un intervallo temporale [0,5] sec. e visualizzare la dinamica della soluzione utilizzando l'opzione **Postprocessing/Animate**.

Esercizio 6

Un problema di Elettrostatica

in modalità Electromagnetics/Electrostatics

- Determinare il potenziale elettrostatico v in una struttura quadrata con una cavità quadrata al suo interno. Questo porta al problema di risolvere l'equazione di Laplace

$$\boxed{\begin{array}{l} \Delta v = 0 \quad su \quad \Omega, \\ v = 1000 \quad su \quad \partial\Omega \ \ \text{interno}, \\ v = 0 \quad su \quad \partial\Omega \ \ \text{esterno}, \end{array}}$$

- Dominio: due quadrati concentrici con lati di lunghezza 0.2 e 0.5.
- Risolvere il problema e visualizzare il potenziale elettrostatico v, il campo elettrico E e il campo di spostamento D, equazione di Maxwell:

$$\nabla D = r, D = \varepsilon E, \quad Poisson \quad -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v) 0 r$$

- Per una migliore visualizzazione delle linee di equipotenziale (esempio ogni 100 volt), selezionare un **contour plot** dalla **Plot Parameter** box e porre 0:100:1000 nel campo **contour plot levels.**

Esercizio 7

Un problema di Diffusione (problema parabolico)
in modalità Heat Transfer

- Poichè la conduzione di calore è un processo diffusivo, l'equazione generale di diffusione ha la stessa struttura dell'equazione del calore:

$$\boxed{\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q \quad su \quad \Omega}$$

- dove T rapresenta la concentrazione, k è il coefficiente di diffusione e Q è una sorgente. Il procedimento di diffusione può essere anisotropico, in tal caso k è una matrice 2x2.
- Risolvere in T su un dominio quadrato di lato 2, con condizioni di Dirichlet (concentrazione sul boundary) specificate.
- Risolvere e visualizzare la dinamica della soluzione approssimata mediante il check box **Animate** in **Plot Parameter.**