

Zadanie 1. Rozważamy następujący problem reakcji z dyfuzją

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + R(c), \\ c(0, t) = 0.2, \quad c(\ell, t) = 0.5, \end{cases} \quad (1)$$

oraz warunek początkowy $c(x, 0) = c_{pocz}(x)$ dla $x \in [0, \ell]$. Funkcje $c_{pocz}(x)$, $R(c)$, v są zadane, a prędkość v jest stała. Zauważ, że warunki brzegowe są warunkami typu Dirichleta!

Człon reakcyjny $R(c) = k c(A - c)$ i warunek początkowy:

$$c_{pocz}(x) = \begin{cases} c_{pocz,1} & \text{dla } x \leq \ell/3 \\ c_{pocz,2} & \text{dla } \ell/3 < x \leq 2\ell/3 \\ c_{pocz,3} & \text{dla } x > 2\ell/3 \end{cases} \quad (2)$$

Wartości parametrów:

$$D = 0,012 \text{ m}^2 / \text{s}, \quad A = 1,5 \text{ mol} / \text{dm}^3, \quad k = 0,45 \text{ dm}^3 / (\text{mol} \cdot \text{s})$$

$$c_{pocz1} = 1,2, \quad c_{pocz2} = 0,8, \quad c_{pocz3} = 1,84 \text{ mol} / \text{dm}^3, \quad \ell = 10 \text{ cm}, \quad v = 0,01 \text{ cm} / \text{s},$$

Wykonaj w COMSOLu następujące obliczenia:

- Profile stężeń dla $t = 1, 2, 5, 8, 15, 25 \text{ s}$.
- Dokonaj wyboru innej dyskretyzacji przestrzennej („Mesh”) niż standardowa.

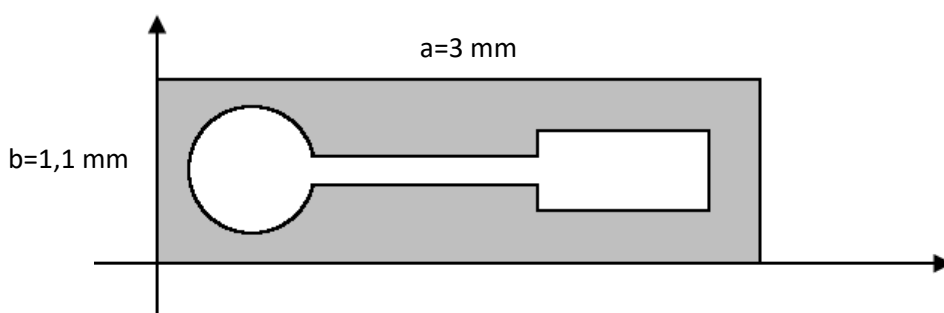
WYNIKI:

- Próbnik dla $x = \ell/4$ pokazujący ewolucję członu reakcyjnego w tym punkcie.
- Próbnik pokazujący jak całkowita ilość substancji w układzie zależy od czasu.
- Wykres stężenie dla czasu 2, 5, 25 s. Wykres powinien mieć tytuł użytkownika oraz własny opis osi.

Zadanie 2. Wykonać projekt w COMSOL-u, który rozwiązuje problem dyfuzyjnego transportu masy w geometrii 2D. Strumień jest dany I prawem Ficka

$$\mathbf{J} = -D \nabla c,$$

gdzie współczynnik dyfuzji $D = 4,3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 / \text{s}$. Obszar jest pokazany na rysunku (szara część).



Szerokość i wysokość małego prostokąta wynoszą 0.6 mm oraz 0.3 mm. Środek małego prostokąta ma współrzędne $(0.6a, b/2)$. Środek koła ma współrzędne $(0.2a, b/2)$, promień $r = b/3$. Kanał łączący trzeba tak zdefiniować, aby miał wysokość (w kierunku OY) $h = r/4$ i łączył koło z małym prostokątem symetrycznie.

Przyjąć następujące warunki brzegowe Dirichleta oraz warunek początkowy:

- Wewnętrzny brzeg: $c = 50 \text{ mol} / \text{m}^3$ dla koła, $c = 80 \text{ mol} / \text{m}^3$ dla małego prostokąta, $c = 0$ dla kanału łączącego.
- Zewnętrzny brzeg $c = 150$ na lewym i górnym boku, pozostałe boki są izolowane.
- Warunek początkowy $c(x, y, 0) = 10(x/a)(y/b)$.

WYNIKI:

(i) W projekcie powinny być dwa wykresy typu 2D Plot: jeden zwykły płaski kolorowy, drugi powierzchniowy. Siatka (Mesh) – *Extra fine*. Czas $0 \leq t \leq 2000\text{s}$.

(ii) Stworzyć wykres obliczający średnie stężenie w układzie w funkcji czasu.

(iii) Stworzyć wykres obliczający całkowitą masę w układzie ($m = M \int_{\text{Obszar}} c \, dx \, dy$), w funkcji czasu, gdzie M to masa molowa KMnO_3 . Jako grubość (wysokość w kierunku Oz) $H = 2 \text{ mm}$.