Handreichung zur Übung 1

Herleitung und Theorie zur Übung 1: Stationäre Transportgleichung

1 Exkurs: Die Advektions-Diffusions-Gleichung

Dies ist eine zur Vorlesung alternative Herleitung!

Die Masse m (M) eines gelösten Stoffes in einem beliebigen ortsfesten Kontrollvolumen V (L^3) ergibt sich durch die Integration der Konzentration c (M/L^3) des Stoffes über das Volumen:

$$m = \int_V c \, \mathrm{d}V. \tag{1}$$

Betrachten wir ein Kontrollvolumen, das sich mit der Strömung mitbewegt. Die Summe der zeitlichen Änderung der Massen im Kontrollvolumen und aller Massenflüsse $\vec{j}(c)$ ($M/L^2/T$) senkrecht durch die Oberfläche des Volumens A (L^2) ist gleich der zeitlichen Massenänderung durch Quellen oder Senken s innerhalb des Kontrollvolumens. Die Gleichung für diese Massenbilanz lautet

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} \mathrm{d}V + \int_A \vec{j}(c) \cdot \vec{n} \mathrm{d}A = \int_V s \mathrm{d}V. \tag{2}$$

Hier ist $\vec{n}$ (-) ein Vektor, der senkrecht auf der Oberfläche des Kontrollvolumens steht. Es gibt advektive und diffusive Massenflüsse

$$\vec{j}(c) = \vec{v}c - D\vec{\nabla}c. \tag{3}$$

Der Massenfluss ist proportional zum Produkt aus dem Gradienten der Konzentration und dem Diffusionskoeffizienten $D = D(x)$ (L^2/T) und kann auch auf einem Geschwindigkeitsfeld $\vec{v} = \vec{v}(\vec{x})$ (L/T) transportiert werden. Der Gaußsche Integralsatz überführt das Oberflächenintegral in Gleichung 2 in ein Volumenintegral.

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} \mathrm{d}V + \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(c) \, \mathrm{d}V = \int_V s \, \mathrm{d}V. \tag{4}$$

Dies lässt sich umformen zu

$$\int_V \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}c) - \vec{\nabla} \cdot D\vec{\nabla}c - s \right) \mathrm{d}V = 0. \tag{5}$$

Damit das Integral diese Bedingung erfüllt, muss der Integrand ebenfalls null sein. Es ergibt sich so die instationäre Advektions-Diffusions-Gleichung:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}(\vec{x})\ c) - \vec{\nabla} \cdot D(\vec{x})\vec{\nabla}c = s. \tag{6}$$

Diese Gleichung kann abhängig von der Problemstellung weiter vereinfacht werden. Wie das genau funktioniert, wird im Modul "Stoff- und Wärmetransport" behandelt. Im Folgenden betrachten wir Stofftransport in einem Fluss und treffen dabei folgende Annahmen:

- Die Fließrichtung ist in positiver x-Richtung. Daher keine Strömung in y- und z-Richtung
- Der Fluss ist über die Breite y und die Tiefe z vollständig durchmischt
- Die Strömungsgeschwindigkeit v sowie die Diffusion D ist räumlich konstant
- Im Fluss sind keine Quellen und Senken s

Es ergibt sich dann die eindimensionale Advektions-Diffusions-Gleichung

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v\frac{\partial c}{\partial x} \tag{7}$$

Im Folgenden wollen wir zunächst den stationären Fall betrachten. Stationär bedeutet, dass sich hier die Verteilung einer Stoffkonzentration im Gebiet zeitlich nicht verändert. Instationär bedeutet, dass sich die Verteilung einer Stoffkonzentration zeitlich verändern kann, und ist Inhalt der Übung 3.

2 Die stationäre Advektions-Diffusions-Gleichung

Im stationären Fall lautet die Advektions-Diffusions-Gleichung

$$v\frac{\partial c}{\partial x} - D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \tag{8}$$

Hier ist $c = c\,(x)$ die gesuchte Konzentration eines gelösten Stoffes. Dieser wird mit der Advektionsgeschwindigkeit v und dem Diffusionskoeffizienten D transportiert.

Diese Gleichung soll nun für die Randbedingungen $c\,(\hat{x} = 0) = 0$ und $c\,(\hat{x} = 1) = 1$ auf einem Gebiet der Länge L analytisch gelöst werden. Dazu werden zunächst dimensionslose Zahlen eingeführt. Die auf eins normierte Ortskoordinate (dimensionslos!) ist

$$\hat{x} = \frac{x}{L}. \tag{9}$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{L}\frac{\partial}{\partial \hat{x}}. \tag{10}$$

Dies wird in die stationäre Advektions-Diffusions-Gleichung eingesetzt.

$$\frac{vL}{D}\frac{\partial c}{\partial \hat{x}} - \frac{\partial^2 c}{\partial \hat{x}^2} = 0 \tag{11}$$

Die Gleichung ist jetzt dimensionslos. Die Peclet-Zahl lautet

$$Pe = \frac{vL}{D}. \tag{12}$$

Die Peclet-Zahl vergleicht die advektive ($t_a = L/v$) und diffusive ($t_d = L^2/D$) Zeitskala über das gesamte Gebiet. Die dimensionslose stationäre Advektions-Diffusions-Gleichung ist damit

$$Pe\frac{\partial c}{\partial \hat{x}} - \frac{\partial^2 c}{\partial \hat{x}^2} = 0. \tag{13}$$

Setzt man den Ansatz $c(x) = A \cdot \exp(\lambda \cdot x)$ in die Differentialgleichung ein, erhält man die charakteristische Gleichung

$$Pe\lambda - \lambda^2 = 0 \tag{14}$$

Die Nullstellen dieses charakteristischen Polynoms sind $\lambda_1 = 0$ und $\lambda_2 = Pe$. Die generelle Lösung ist

$$c(\hat{x}) = c_1 \exp(Pe \cdot \hat{x}) + c_2. \tag{15}$$

Die Konstanten c_1 und c_2 lassen sich über die Randbedingungen bestimmen. Die analytische Lösung für diese Problemstellung lautet mit $c_1 = 1/(\exp(Pe) - 1)$ und $c_2 = -c_1$:

$$c\left(\hat{x}\right) = \frac{\exp\left(Pe \cdot \hat{x}\right) - 1}{\exp\left(Pe\right) - 1}. \tag{16}$$