Die Konvektions-Diffusionsgleichung

Der vorliegende Text beschreibt die Teilchendichte (=„Teilchenkonzentration“) c eines bestimmten Stoffes in einem fluiden mit der Geschwindigkeit v strömenden Medium bei gleichzeitiger überlagerter Diffusion (=ist thermisch bedingter Transport eines Stoffes aufgrund der zufälligen Bewegung der Teilchen, Stichwort: Brownsche Molekularbewegung). Wir beschränken die Herleitung der mathematischen Einfachheit wegen auf eine Dimension. Zuerst wird eine Gleichung zur Beschreibung der Konvektion (=Kontinuitätsgleichung) hergeleitet, im Anschluss daran die Diffusion mathematisch/physikalisch beschrieben. Aus der Kombination beider Teile wird abschließend die Konvektions-Diffusionsgleichung aufgestellt und diskutiert.

1 Herleitung

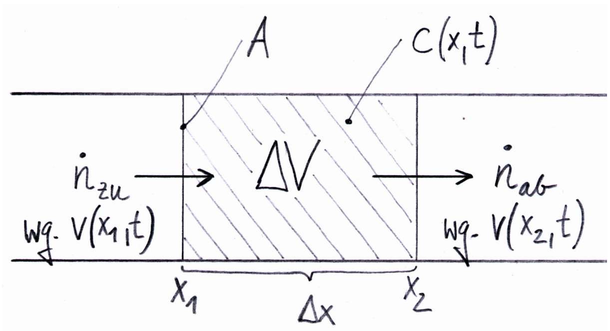
Wir betrachten einen Stoff in einem Fluid mit der veränderlichen Teilchendichte $c = c(x,t)$. Es gilt (für die mittlere Teilchendichte)

$$\overline{c} = \frac{\Delta n}{\Delta V}, \tag{1}$$

wobei Δn die Teilchenzahl des Stoffes einem Kontrollvolumen ΔV bezeichnet. Die Teilchendichte hat somit die Einheit $[c] = \frac{[\Delta n]}{[\Delta V]} = \frac{1}{m^3}$, sprich „Teilchen pro Kubikmeter“.

1.1 Reine Konvektion

Das Fluid strömt mit der Geschwindigkeit $v = v(x,t)$ durch ein Rohr mit der konstanten Querschnittsfläche A (siehe Skizze).



Im Folgenden wird die Teilchenbilanz für das Kontrollvolumen $\Delta V = A\,\Delta x$ (mit $\Delta x = x_2 - x_1$) aufgestellt. Während des infinitesimal kleinen Zeitintervalls dt wird durch die Grenzfläche A an der Stelle x_1 die Teilchenzahl

$$dn_{zu} \quad = \quad c(x_1,t)\,A\,v(x_1,t)\,dt \tag{2}$$

zu- und durch die Grenzfläche A an der Stelle x_2 die Teilchenzahl

$$dn_{ab} \quad = \quad c(x_2,t)\,A\,v(x_2,t)\,dt \tag{3}$$

abgeführt. Daraus ergeben sich für die zu- und abfließenden Teilchenströme

$$\dot{n}_{zu} \quad = \quad \dot{n}(x_1,t) = c(x_1,t)\,A\,v(x_1,t), \tag{4a}$$
$$\dot{n}_{ab} \quad = \quad \dot{n}(x_2,t) = c(x_2,t)\,A\,v(x_2,t). \tag{4b}$$

Die Teilchenzahländerung in einem infinitesimal kleinen Volumen $dV = A\,dx$ beträgt im Zeitintervall $[t_1,t_2]$

$$dn = (c(x,t_2) - c(x,t_1))\,A\,dx. \tag{5}$$

Die Gesamtteilchenzahländerung Δn im Kontrollvolumen ΔV während des Zeitintervalls $[t_1, t_2]$ erhalten wir einerseits durch die räumliche Integration von (5)

$$\Delta n = \int_{x_1}^{x_2} dn = \int_{x_1}^{x_2} (c(x,t_2) - c(x,t_1))\, A\, dx, \tag{6}$$

und andererseits durch das zeitliche Integral der Bilanz „Zufluss − Abfluss“

$$\begin{aligned} \Delta n &= \int_{t_1}^{t_2} (dn_{zu} - dn_{ab}) = \int_{t_1}^{t_2} (\dot{n}_{zu} - \dot{n}_{ab})\, dt && \text{(7a)} \\ &\overset{(4)}{=} \int_{t_1}^{t_2} A\, (c(x_1,t)\, v(x_1,t) - c(x_2,t)\, v(x_2,t))\, dt. && \text{(7b)} \end{aligned}$$

Durch Gleichsetzen von (6) und (7) erhält man die Kontinuitätsgleichung für die Teilchendichte in ihrer Integraldarstellung

$$\int_{x_1}^{x_2} (c(x,t_2) - c(x,t_1))\, A\, dx = \int_{t_1}^{t_2} A\, (c(x_1,t)\, v(x_1,t) - c(x_2,t)\, v(x_2,t))\, dt. \tag{8}$$

Da das Lösen von Integralgleichungen beim praktischen Rechnen aufgrund der erhöhten Komplexität soweit es geht vermieden wird, wandelt man diese Gleichung mit Hilfe der Hauptsatzes der Differential- und Integralrechnung[1] in eine (partielle) Differentialgleichung um. Es gilt somit

$$\begin{aligned} c(x,t_2) - c(x,t_1) &= \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\, dt, && \text{(9)} \\ c(x_1,t)\, v(x_1,t) - c(x_2,t)\, v(x_2,t) &= -\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial (c(x,t)\, v(x,t))}{\partial x}\, dx. && \text{(10)} \end{aligned}$$

Durch Einsetzen von (9) und (10) in (8) und Vertauschen der Integrationen gelangt man zu

$$\int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} A\, \frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\, dt\, dx = -\int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} A\, \frac{\partial (c(x,t)\, v(x,t))}{\partial x}\, dt\, dx, \tag{11}$$

bzw. nach Umformung zu

$$\int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} A \left(\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial (c(x,t)\, v(x,t))}{\partial x} \right) dt\, dx = 0. \tag{12}$$

Da die letzte Gleichung für beliebige Rohrabschnitte $[x_1, x_2]$ und beliebige Zeitintervalle $[t_1, t_2]$ gilt, muss der Integrand

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial \overbrace{(c(x,t)\, v(x,t))}^{=j}}{\partial x} = 0. \tag{13}$$

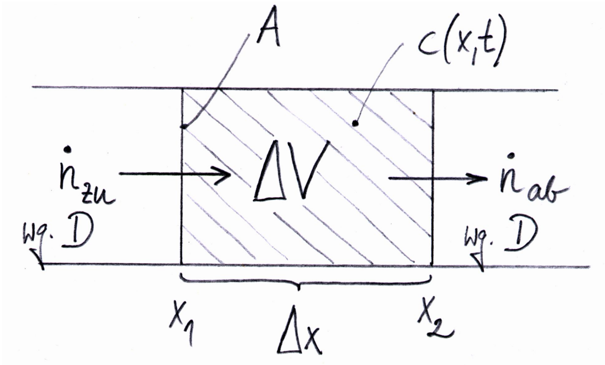
Dies ist die Standarddarstellung der Kontinuitätsgleichung (für die Teilchenzahlerhaltung) als partielle Differentialgleichung. Die Größe j bezeichnet hierin die (Teilchen-)Flussdichte.

1.2 Reine Diffusion

Gegeben sei ein Rohr mit der Querschnittsfläche A und dem (zur Vereinfachung) konstant angenommenen Diffusionskoeffizienten D. Dieser ist ein Maß dafür, wie leicht/schnell die Diffusion im betrachteten Medium abläuft. Das Rohr sei dabei so dünn, dass in der gesamten Querschnittsfläche A die Teilchendichte c des diffundierendenen Stoffes als gleich betrachtet werden kann (1D-Problem).

Als Ansatz für die Herleitung stellen wir die Teilchenflussbilanz für einen Rohrabschnitt Δx bzw. das zugehörige Volumenelement ΔV auf (siehe Skizze).

[1] $\int_a^b f(x)\, dx = F(b) - F(a)$, mit F = Stammfunktion von f, d.h. $\frac{dF(x)}{dx} = f(x)$.

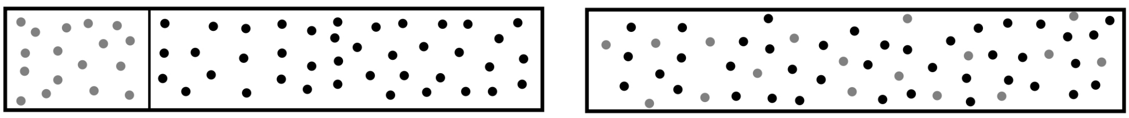


Gemäß der Skizze gibt es aufgrund der Diffusion mit dem Koeffizienten D an der Stelle x_1 einen Teilchenzufluss $\dot{n}_{zu} = \dot{n}(x_1)$ in das Volumenelement ΔV und an der Stelle $x_2 = x_1 + \Delta x$ einen Abfluss $\dot{n}_{ab} = \dot{n}(x_2)$.

Für den aufgrund der Diffusion auftretenden Teilchenstrom $\dot{n} = \frac{dn}{dt}$ gilt

$$\dot{n} = -D\,A\,\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}. \tag{14}$$

Gleichung (14) beschreibt folgerichtig, dass die Diffusion (abgesehen von der Größe von D) umso schneller abläuft, je größer die Querschnittsfläche A des Rohres ist und je größer der Konzentrationsgradient ist (auch bekannt als 1. Ficksches Gesetz[2]). Für die Einheit des Diffusionskoeffizienten D gilt somit $[D] = \frac{[\dot{n}]}{[A]\left[\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}\right]} = \frac{m^2}{s}$.



Da die Diffusion stets zu einer näherungsweisen Gleichverteilung der Teilchen führt und damit immer von Gebieten mit höherer Teilchendichte c zu Gebieten niedrigerer Teilchendichte verläuft (siehe obige Abbildung), heißt das, dass im betrachteten Fall die Teilchendichte für größer werdende x kleiner wird und das Konzentrationsgefälle somit $\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}$ negativ sein muss $\Rightarrow -\frac{\partial c(x,t)}{\partial t}$.

Im Zeitintervall dt gilt für die gesamte über die Grenzen an den Stellen x_1 und x_2 des Volumenelements ΔV transportierte Teilchenzahl dn_{tr}

$$\begin{aligned}
\dot{n}_{tr} = \frac{dn_{tr}}{dt} &= \dot{n}_{zu} - \dot{n}_{ab} && (15)\\
&= \dot{n}(x_1) - \dot{n}(x_2) && (16)\\
&= -D\,A\,\frac{\partial c(x_1,t)}{\partial x} - \left(-D\,A\,\frac{\partial c(x_2,t)}{\partial x}\right) && (17)\\
\Rightarrow dn_{tr} &= D\,A\left(\frac{\partial c(x_2,t)}{\partial x} - \frac{\partial c(x_1,t)}{\partial x}\right) dt. && (18)
\end{aligned}$$

Für den Zeitraum $\Delta t = [t_1, t_2]$ folgt daraus

$$n_{tr} = D\,A\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial c(x_2,t)}{\partial x} - \frac{\partial c(x_1,t)}{\partial x}\right) dt. \tag{19}$$

Die Änderung der Teilchenzahl dn eines infinitesimal kleinen Längenabschnitts dx des Rohres im Zeitintervall Δt kann durch

$$dn = dV\;\left(c(x,t_2) - c(x,t_1)\right) \tag{20}$$

[2]Benannt nach Adolf Fick (deutscher Physiologe), 1829-1901.

beschrieben werden, wobei $dV = Adx$ das Volumen des Rohrabschnitts dx bezeichnet. Die Änderung der Teilchenzahl im gesamten Volumenelement ΔV berechnet man durch Integration über die Ortskoordinate

$$\begin{aligned}\Delta n &= \int_{x_1}^{x_2} dn && (21)\\ &= \int_{x_1}^{x_2} A\,dx\,\left(c(x,t_2) - c(x,t_1)\right) && (22)\\ &= A\int_{x_1}^{x_2} \left(c(x,t_2) - c(x,t_1)\right)\,dx. && (23)\end{aligned}$$

Da die Teilchenzahl eine Erhaltungsgröße ist, gilt mit (19) und (23)

$$\Delta n = n_{tr} \tag{24}$$

bzw.

$$A\int_{x_1}^{x_2} \left(c(x,t_2) - c(x,t_1)\right)\,dx = D\,A\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial c(x_2,t)}{\partial x} - \frac{\partial c(x_1,t)}{\partial x}\right)\,dt, \tag{25}$$

wobei die Integranden auf beiden Seiten nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung wie folgt angeschrieben werden können

$$\begin{aligned} c(x,t_2) - c(x,t_1) &= \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\,dt, && (26)\\ \frac{\partial c(x_2,t)}{\partial t} - \frac{\partial c(x_1,t)}{\partial t} &= \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}\right)\,dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\,dx. && (27)\end{aligned}$$

Wir setzen die letzten beiden Beziehungen in (25) ein, dividieren die gesamte Gleichung durch A und vertauschen auf der rechten Seite die Reihenfolge der Integrale

$$\int_{x_1}^{x_2}\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t}\,dtdx = D\int_{x_1}^{x_2}\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\,dtdx. \tag{28}$$

Durch weitere Umformung gelangt man zu

$$\int_{x_1}^{x_2}\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} - D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}\right) = 0. \tag{29}$$

Da die letzte Beziehung für beliebige Rohrabschnitte $\Delta x = [x_1, x_2]$ und beliebige Zeitintervalle $\Delta t = [t_1, t_2]$ erfüllt sein muss, gilt

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} - D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = 0 \text{ (Diffusionsgleichung).} \tag{30}$$

Bemerkung: Die Diffusionsgleichung wird in der Literatur auch als 2. Ficksches Gesetz bezeichnet.

1.3 Kombination aus Konvektion und Diffusion

Treten Konvektion und Diffusion im betrachteten Medium gleichzeitig auf, kombiniert man die Gleichungen (13) und (30) wie folgt

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial c(x,t)v(x,t)}{\partial x} - D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = 0. \tag{31}$$

Als Begründung für (31) schreiben wir die Gleichungen (13) und (30) in leicht veränderter Form noch einmal an

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\underbrace{(-c(x,t)\,v(x,t))}_{=j_K} \tag{32}$$

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\left(D\frac{\partial c(x,t)}{\partial x}\right)}_{=j_D} \tag{33}$$

und bezeichnen die Ausdrücke in den Klammern auf den rechten Seiten naheliegend als Konvektionsflussdichte j_K und Diffusionsflussdichte j_D. Tritt sowohl Konvektion, als auch Diffusion auf, gilt für die Gesamtflussdichte

$$j_{ges} = j_K + j_D. \tag{34}$$

Setzt man diese in (13) (=Kontinuitätsgleichung) statt j_K ein, erhält man nach Ausführung der Differentiation und Umstellen der Terme die Konvektions-Diffusiongleich-ung (31).

2 Diskussion und Lösung

Für die (isolierte) Lösung von (31) muss $v = v(x,t)$ a priori bekannt sein. Wir betrachten den Spezialfall einer konstanten Strömung, d.h. $v = konst.$, wodurch sich (31) zu

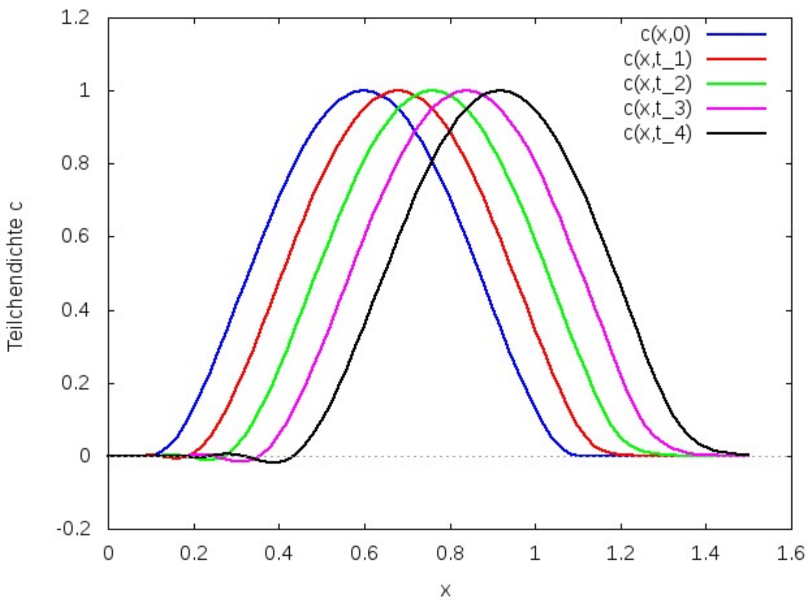
$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + v\,\frac{\partial c(x,t)}{\partial x} - D\frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} = 0 \tag{35}$$

vereinfacht.

Die folgenden Unterabschnitte zeigen den zeitlichen Verlauf der Lösungen für die angegebenen Fälle.

2.1 Reine Konvektion: $v > 0, D = 0$

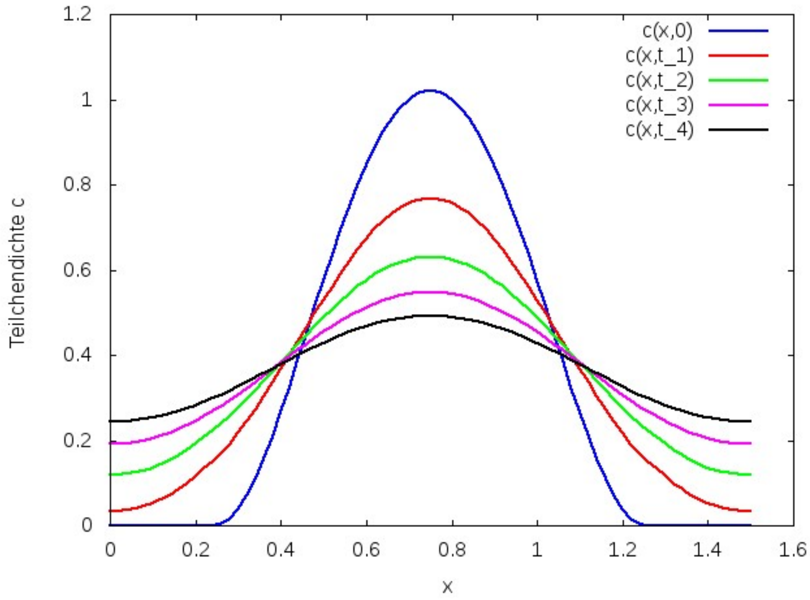
Bringt man in eine konstante Strömung einen Farbtropfen ein, der nicht zerfließt, so wird dieser bei unveränderter Form mit der Strömung mittransportiert.



Bemerkung: Die minimal negativen und somit unphysikalischen Teilchendichten sind „numerische Artefakte“.

2.2 Reine Diffusion: $v = 0, D > 0$

Bringt man in eine ruhende Flüssigkeit einen Farbtropfen ein, so zerfließt dieser aufgrund der stets vorhandenen thermischen Bewegung. Das Konzentrationsmaximum bleibt jedoch an der gleichen Stelle.



2.3 Konvektion und Diffusion kombiniert: $v > 0, D > 0$

Im kombinierten Fall zerfließt der Tropfen, während er mit der Strömung weitertransportiert wird.