IX Transport und Diffusion

77 Mathematische Modellierung des Transports von Flüssigkeiten

Im weiteren Verlauf wird ein mit einer Flüssigkeit gefüllter Schlauch betrachtet, wobei die folgenden weiteren Bedingungen erfüllt seien:

(77.1)

- (i) Der Schlauch wird zur Vereinfachung als halb unendlich lang angenommen und verlaufe von $x = 0$ bis $x = \infty$.
- (ii) Es wird außerdem noch angenommen, dass es sich um eine inkompressible Flüssigkeit handelt, sie kann also nicht komprimiert werden.
- (iii) Am linken Ende des Schlauches, also bei $x = 0$, wird ab dem Zeitpunkt $t = 0$ mit konstanter Geschwindigkeit $c > 0$ weitere Flüssigkeit in den Schlauch gepumpt.
- (iv) In der Flüssigkeit selbst befinde sich eine Substanz, etwa Salz in gelöster Form oder Farbpartikel. Diese Substanz schwebt in der Flüssigkeit und bewegt sich mit der gleichen Geschwindigkeit wie diese fort.

Teil (iii) in (77.1) zusammen mit der angenommenen Inkompressibilität hat zur Folge, dass sich die Flüssigkeit und mit ihr die Substanz in gesamten Schlauch mit einer konstanten Geschwindigkeit $c > 0$ fortbewegen. Dies bedeutet, dass beide sich vom einem beliebigen Zeitpunkt $t_1 \in [0, T)$ bis zu einem anderen beliebigen Zeitpunkt t_2 mit $t_1 < t_2 \le T$ überall um die Strecke $\Delta x = c(t_2 - t_1)$ nach rechts bewegen.

Die Konzentration der Substanz wird im Folgenden mit $u(x,t)$ bezeichnet und hängt sowohl von der Position x im Schlauch als auch vom betrachteten Zeitpunkt $t \ge 0$ ab. Sie bezeichnet die Masse pro Schlauchlängeneinheit und wird beispielsweise in Milligramm pro Zentimeter angegeben.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei die Konzentration als bekannt vorausgesetzt, die Werte

$$u(x,0) = u_0(x) \text{ für } x \ge 0 \tag{77.2}$$

sind also gegeben. Ebenfalls als bekannt vorausgesetzt

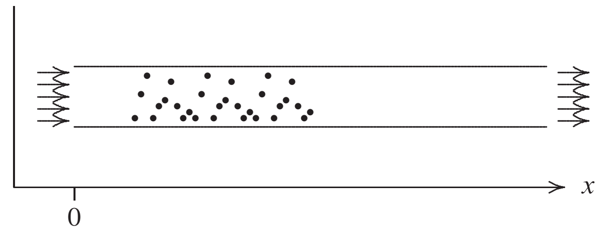

Abb. 147: Betrachtung des Schlauchs zur Zeit $t > 0$

sei für alle Zeiten die Konzentration am linken Rand $x = 0$, die Werte

$$u(0,t) = u_1(t) \text{ für } t \ge 0 \tag{77.3}$$

sind also ebenfalls gegeben. Dabei wird aus Stetigkeitsgründen noch $u_0(0) = u_1(0)$ gefordert.

(77.4) Die Konzentration $u(x,t)$ für $x > 0$, $t > 0$ ist unbekannt und soll bestimmt werden.

Zur Behandlung der Aufgabenstellung wird als Erstes eine mathematische Modellierung vorgenommen, an deren Ende sich eine Bestimmungsgleichung für die gesuchte Konzentration ergibt. Zunächst stellt man anhand von Teil (iii) in (77.1) fest, dass diejenigen Partikel, die sich zur Zeit $t \ge 0$ am Ort x befinden, zur Zeit $t + \Delta t$ im Ort $x + c\Delta t$ angelangt sein müssen. Damit muss für die zugehörige Konzentration naheliegenderweise Folgendes gelten:

$$u(x + c\Delta t, t + \Delta t) = u(x,t) \text{ für } x \ge 0. \tag{77.5}$$

Werden nun die in der Identität (77.5) auftretenden Funktionen nach Δt differenziert, so erhält man mit Hilfe der Kettenregel

$$c\frac{\partial u}{\partial x}(x + c\Delta t, t + \Delta t) + \frac{\partial u}{\partial t}(x + c\Delta t, t + \Delta t) = 0 \quad \text{für } x,\, t,\, \Delta t \ge 0. \tag{77.6}$$

Der Grenzübergang $\Delta t \to 0$ in (77.6) liefert schließlich die *Transportgleichung*

$$\Big(c\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t}\Big)(x,t) = 0 \quad \text{für } x \ge 0,\ t \ge 0. \tag{77.7}$$

Bemerkung 77.1. Es handelt sich bei der Transportgleichung (77.7) mit den dazugehörigen Bedingungen (77.2) und (77.3) um ein *Anfangs-Randwertproblem* für eine *lineare partielle Differenzialgleichung erster Ordnung* mit *konstanten Koeffizienten* für die gesuchte Funktion u. Als partielle Differenzialgleichung bezeichnet man sie wegen der auftretenden unterschiedlichen partiellen Ableitungen. Dabei handelt es sich lediglich um partielle Ableitungen erster Ordnung, so dass man die partielle Differenzialgleichung als von erster Ordnung bezeichnet. Weiterhin stellt für zwei Lösungen u und v sowie reellen Koeffizienten a_1 und a_2 auch die Funktion a_1u+a_2v eine Lösung der Transportgleichung dar, weswegen diese als linear bezeichnet wird. Die auftretenden Koeffizienten schließlich hängen nicht von den Variablen ab, sie sind also konstant. $\triangle$

77.1 Allgemeine Lösung der räumlich halbunendlichen Transportgleichung

Es werden nun die Lösungen der räumlich halbunendlichen Transportgleichung (77.7) bestimmt. Hierzu führt man die Koordinatentransformation

$$\xi = x - ct \in \mathbb{R}, \qquad \eta = x + ct \in \mathbb{R}$$

durch und betrachtet die zugehörige Funktion

$$v(\xi, \eta) := u(x,t) = u\big(\tfrac{\xi+\eta}{2}, \tfrac{\eta-\xi}{2c}\big) \text{ für } \xi, \eta \in \mathbb{R}.$$

Partielle Differenziation nach η liefert

$$\frac{\partial v}{\partial \eta} = \tfrac{1}{2}\big(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{\partial u}{\partial t}\big) \stackrel{!}{=} 0 \text{ für } \xi, \eta \in \mathbb{R}.$$

Es stellt also die Funktion u genau dann eine Lösung der räumlich halbunendlichen Transportgleichung (77.7) dar, wenn $\frac{\partial v}{\partial \eta} = 0$ auf $\mathbb{R}^2$ gilt beziehungsweise

$$v(\xi, \eta) = f(\xi) \text{ für } \xi, \eta \in \mathbb{R}$$

erfüllt ist mit einer differenzierbaren Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Mit den urspünglichen Variablen x, t bedeutet dies

$$u(x,t) = v(\xi, \eta) = f(\xi) = f(x - ct) \text{ für } x \ge 0,\ t \ge 0.$$

Die spezielle Wahl der Funktion f ergibt sich aus den Anfangsbedingungen (77.2) und den Randbedingungen (77.3):

$$f(\xi) = u(\xi, 0) \stackrel{!}{=} u_0(\xi) \text{ für } \xi \ge 0,$$

$$f(\xi) = u(0, -\tfrac{\xi}{c}) \stackrel{!}{=} u_1(-\tfrac{\xi}{c}) \text{ für } \xi < 0.$$

Dabei ist in $\xi = x - ct$ im ersten Fall $\xi \ge 0$ $t = 0$ gewählt, und im zweiten Fall $\xi < 0$ ist $x = 0$, was $t = -\frac{\xi}{c}$ bedeutet. Wir fassen zusammen:

Satz 77.2. *Die gesuchte Lösung des gegebenen Anfangs-Randwertproblems für die Transportgleichung (siehe (77.2), (77.3), (77.7)) ist*

$$u(x,t) = \begin{cases} u_1(t - \frac{x}{c}), & x \le ct, \\ u_0(x - ct), & x > ct, \end{cases}$$

falls diese Funktion u hinreichend glatt ist.

Beispiel 77.3. Wir betrachten die Transportgleichung $(2\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t})(x,t) = 0$ für $x \ge 0, t \ge 0$ mit der Anfangsbedingung $u(x, 0) = e^{-x},\ x \ge 0$, und der Randbedingung $u(0,t) = 1,\ t \ge 0$. Diese besitzt die Lösung

$$u(x,t) = \begin{cases} 1, & x \le 2t, \\ e^{-(x-2t)}, & x > 2t. \end{cases}$$

78 Diffusionsgleichung – Mathematische Modellierung

Es wird wieder ein mit einer Flüssigkeit gefüllter Schlauch betrachtet, wobei nun die folgenden weiteren Bedingungen erfüllt seien:

- Der Schlauch wird als endlich lang angenommen und verlaufe von $x = 0$ bis $x = L$, wobei $L > 0$ eine reelle Zahl ist.
- In der Flüssigkeit selbst befinde sich eine Substanz. Die Konzentration dieser Substanz wird wie bisher mit $u(x,t)$ bezeichnet und hängt wiederum sowohl von der Position x im Schlauch als auch vom betrachteten Zeitpunkt $t \ge 0$ ab.

Anders als bisher liege nun die Situation vor, dass die Substanz durch die im Schlauch befindliche Flüssigkeit wandern (diffundieren) kann.

Im weiteren Verlauf sind die Größen *Fluss* $q(x,t)$ und die Masse der in der Flüssigkeit vorhandenen Substanz von Bedeutung. Diese beiden Größen werden zunächst erläutert sowie deren funktionaler Zusammenhang beschrieben.

- Die Masse der Substanz in einem beliebigen Teilstück $[x, x+\Delta x] \subset [0, L]$ des Schlauches besitzt für kleine Werte $\Delta x > 0$ zur Zeit $t \ge 0$ die näherungsweise Darstellung

$$\int_x^{x+\Delta x} u(y,t)\,dy \approx u(x,t)\Delta x =: M(t). \tag{78.1}$$

Hierbei hängt diese Näherungsdarstellung $M(t)$ für die Masse natürlich auch noch von x und Δx ab und wird beispielsweise in Milligramm angegeben.

- Bei dem *Fluss* $q(x,t)$ handelt es sich um die Menge der Substanz, die zum Zeitpunkt t den Ort x von links nach rechts pro Zeiteinheit passiert. Angegeben wird der Fluss beispielsweise in Milligramm pro Sekunde. Somit stimmt der Fluss $q(x,t)$ mit dem Wert überein, den man erhält, wenn man Menge der Substanz, die sich in der Zeitspanne von t bis $t+\Delta t$ durch den Ort x bewegt, durch Δt dividiert und hierfür anschließend den Grenzwert für $\Delta t \to 0$ bildet. Fließt die Substanz von rechts nach links, so fällt der Fluss negativ aus.
- Es soll *Massenerhaltung* gelten, die zeitliche Änderung der Masse darf also nur von der Differenz zwischen Zu- und Abfluss in dem Teilstück von x bis $x+\Delta x$ abhängen:

$$M'(t) = q(x,t) - q(x+\Delta x,t). \qquad (78.2)$$

Dabei ergibt sich die Identität (78.2) aus der Näherung $M(t+\Delta t) - M(t) \approx \Delta t(q(x,t) - q(x+\Delta x,t))$ und einen Grenzübergang $\Delta t \to 0$.

Ersetzt man in (78.2) auf der linken Seite $M(t)$ durch (78.1), so erhält man

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t)\Delta x = q(x,t) - q(x+\Delta x,t). \qquad (78.3)$$

Division in (78.3) durch Δx und ein anschließender Grenzübergang $\Delta x \to 0$ liefert die Identität

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = -\frac{\partial q}{\partial x}(x,t) \quad \text{für } 0 \le x \le L,\ t > 0. \qquad (78.4)$$

Diese eine Erhaltungsgleichung legt die Funktionen u und q noch nicht in eindeutiger Weise fest, für den Fluss sind weitere Annahmen nötig.

Allgemein wird hierzu noch ein funktionaler Zusammenhang zwischen den Funktionen $\frac{\partial u}{\partial x}$ und q von der Form

$$q = -\varphi\big(\frac{\partial u}{\partial x}\big), \ \varphi \text{ monoton wachsend}, \ \varphi(0) = 0, \qquad (78.5)$$

angenommen, wobei die Funktion $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ als bekannt vorausgesetzt wird. Diese Beziehung (78.5) wird als *Diffusionsgesetz* bezeichnet. Die spezielle Forderung an die Funktion φ ist plausibel und lässt sich für eine ruhende Flüssigkeit schnell einsehen. Dort ist das Konzentrationsgefälle $\frac{\partial u}{\partial x}$ alleine für die Änderung der Konzentration selbst verantwortlich. Unterstellt man noch, dass die Substanz sich gleichverteilen möchte, so bewirkt jede Ungleichheit der Konzentration beziehungsweise jedes Konzentrationsgefälle einen Fluss der Substanz in Richtung des Ortes mit kleinerer Konzentration.

Das einfachste Diffusionsgesetz (*erstes ficksches Gesetz*) besagt nun, dass der Fluss q linear vom Konzentrationsgefälle $\frac{\partial u}{\partial x}$ abhängt,

$$q(x,t) = -c^2\frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \quad \text{für } 0 \le x \le L, \quad t > 0. \qquad (78.6)$$

Hierbei ist $c^2 > 0$ (mit $c > 0$) eine materialspezifische Konstante, die auch als *Diffusionskonstante* bezeichnet wird. Typischerweise bestimmt man sie durch Messungen. Partielle Differenziation nach x in der Gleichung (78.6) und ein anschließendes Einsetzen des Ergebnisses in (78.4) liefert schließlich die *Diffusionsgleichung*

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \text{ für } 0 \le x \le L,\ t \ge 0. \qquad (78.7)$$

Es sei nun noch die örtliche Verteilung der Konzentration zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ als bekannt vorausgesetzt, die Werte

$$u(x,0) = u_0(x) \quad \text{für } 0 \le x \le L \qquad (78.8)$$

seien also gegeben. Außerdem seien an den Rändern noch Bedingungen an die Konzentration gegeben, beispielsweise

$$u(0,t) = \beta_1(t), \quad u(L,t) = \beta_2(t) \quad \text{für } t \ge 0 \qquad (78.9)$$

mit vorgegebenen Funktionen $\beta_1,\ \beta_2 : \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$. In Abb. 148 sind die vorgegebenen Daten des Anfangs-Randwertproblems für die Diffusionsgleichung in der Orts-Zeit-Ebene dargestellt.

Bemerkung 78.1. a) Es handelt sich bei der Diffusionsgleichung (78.7) (die auch als *Wärmeleitungsgleichung* bezeichnet wird) um eine *lineare partielle Differenzialgleichung zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten* für die gesuchte Funktion u. Diese Bezeichnungen ergeben sich genauso wie die entsprechenden Bezeichnungen für die Transportgleichung in Bemerkung 77.1 auf Seite 225. Die Ordnung zwei der partiellen Differenzialgleichung ergibt sich aus der höchsten auftretenden partiellen Ableitung. Wegen der auftretenden Randbedingungen (78.9) und der Anfangsbedingung (78.8) spricht man kurz von einem *Anfangs-Randwertproblem.* In anderen Anwendungen können aber durchaus Anfangs- und Randbedingungen von anderer Form auftreten können.