SCIENTIFIC COMPUTING

Die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung (WLG)

Begriffe

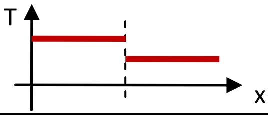
Temperatur	T	$[T] = K, °C$	Mass für die kinetische Energie von Molekülen, bei einer ungeordneten Bewegung
Spezifische Wärmekapazität	C	$[C] = \frac{J}{kg\,K}$	Verbindung von Temperatur und Energie $\Delta E = m\,C\,\Delta T$
Wärmefluss	q	$[q] = \frac{J}{s\,m^2} = \frac{W}{m^2}$	grösser je grösser die Temperaturdifferenz, von Plus nach Minus
Wärmeleitkoeffizient	k	$[k] = \frac{W}{m\,K}$	see table below
Fourier'sche Gesetz		$q = -k * \frac{\partial T}{\partial x}$	$[q] = \frac{W}{m^2}$
Spezifische Wärmeleistung	Q	$[Q] = \frac{W}{m^3}$	
Termische Relaxaltionszeit		$\tau = \frac{l^2\,\rho\,C}{k}$	typische Zeitkonstante für die Wärmeleitungsgleichung

	Kupfer	Silizium	Stahl	Glas	Wasser	Luft	Eis
k	400	90	40	1.2	0.6	0.024	0.15

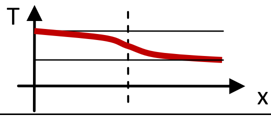
Beispiel

Zwei Gegenstände mit unterschiedlichen Temperaturen werden in Kontakt gebracht

jetzt
$g \sim \Delta T$

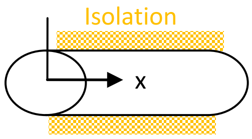


nach 10s
$g \sim \frac{\partial T}{\partial x}$



Herleitung

Gegeben



Gesucht

$T = T(t, x)$

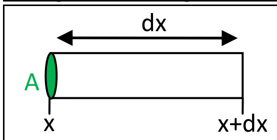
Ansatz

$E = m\,C\,T$

$q = -k * \frac{\partial T}{\partial x}$

Lösung über Energieerhaltungssatz

Energiebilanz in ganz kleinem Gebilde



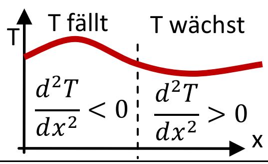
Änderung der inneren Energie	=	Summe aller Wärmeflüsse $[W]$	+	Wärmeleistung $[W]$
$\rho\,A\,dx\,C\,\frac{\partial T}{\partial t}$	=	$A\,q(t,x) - A\,q(t, x+dx)$	+	$Q\,A\,dx$

Endresultat

transient (=instationär) eindimensionale WLG	stationäre eindimensionale WLG
$\rho\,C\,\frac{\partial T}{\partial t} - k\,\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = Q$	$-k\,\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = Q$

Beispiel

Gegeben	Daraus folgt	Geometrische Bedeutung
$Q = 0$ $\rho, C, k = 1$	$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$	sie mag keine Krümmungen sie gleicht Krümmungen aus, bis sie Null ist (Gerade)



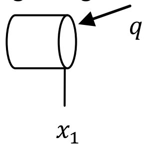
Anfangs und Randbedingungen

- Bei der transienten WLG muss die Temperatur zum Zeitpunkt t=0 angegeben werden.

  $T(t = 0, x) = T_0(x)$, $T_0(x)$ ist gegeben

Möglichkeiten von Randbedingungen (RB)

Vorgabe der Temperatur (**Dirichlet-RB**)	Vorgabe vom Wärmefluss (**Neumann-RB**)	Newtonsches Abkühlungsgesetzt (**Robin-RB**)
$T(t, x = 0) = 17°C$	$k\,\frac{\partial T}{\partial x}(t, x = 0) = q_0$	T_∞ Umgebungstemperatur $q = h\,(T_\infty - T_1)$



h, Wärmeübergangs-koeffizient	$h\,\left(\frac{W}{m^2\,K}\right)$
stehende Luft	$3 - 10$
strömende Luft	$10 - 100$
ruhendes Wasser	$100 - 500$
strömendes Wasser	$500 - 10'000$

Vektoranalysis

Vektorfeld

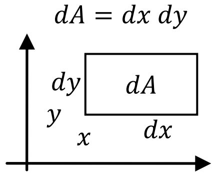
$\vec{\boldsymbol{v}}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

$$\vec{v}(x,y) = \begin{pmatrix} v_x(x,y) \\ v_y(x,y) \\ v_z(x,y) \end{pmatrix}$$

Divergenz (=Quellenstärke) eines Vektorfeldes

Wie viel von $\vec{v}$ verlässt das Rechteck

$dA = dx\ dy$



Fluss in x und y:

$$\phi_x = -v_x(x,y)\ dy + v_x(x+dx,y)dy$$
$$\phi_y = -v_y(x,y)\ dx + v_y(x,y+dy)dx$$

Insgesamt verlässt dA

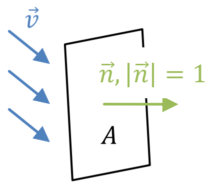
$$\phi = \phi_x + \phi_y = \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y}\right) dx\ dy$$

Divergenz des Vektorfeldes v

$$\boxed{div * \vec{v} = \nabla * \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}}$$

Integralsatz von Gauss

Fluss durch Fläche



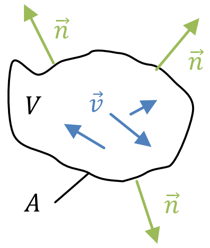
$\vec{v} = const$

$\phi = \vec{v} * \vec{n} * A$

$\vec{v} \neq const$

$$\phi = \int_A \vec{v} * \vec{n} * dA$$

Fluss durch geschlossene Fläche

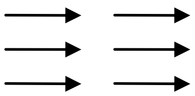


Schale

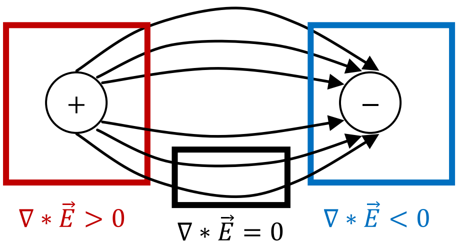
$$\phi = \oint_A \vec{v} * \vec{n} * dA$$

Beispiele

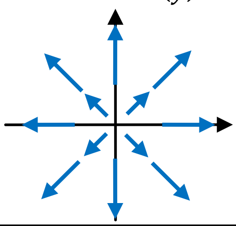
$$\vec{v}(x,y) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Beispiel



$$\vec{v}(x,y) = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$



Bedeutung der Divergenz

$\nabla * \vec{v} > 0$	Quelle
$\nabla * \vec{v} < 0$	Senke

Satz von Gauss

$$\oint_A \vec{v} * \vec{n} * dA = \int_V div * \vec{v} * dV$$

Rechenregeln

$$\nabla * (\vec{v} + \vec{w}) = \nabla * \vec{v} + \nabla * \vec{w}$$
$$\nabla * (\lambda * \vec{v}) = \lambda * \nabla * \vec{v}$$
$$\nabla\ (f * \vec{v}) = (\nabla * f) * \vec{v} + f * (\nabla * \vec{v})$$

$\lambda = Zahl$

$f = Funktion$

Differentiell

$$\vec{v} * \vec{n} * dA = div * \vec{v} * dV$$

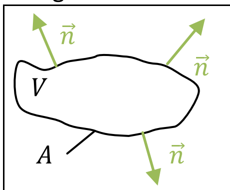
Die 3D-WLG

Übersicht

1D	3D
$T(t,x)$	$T(t,x,y,z)$
$q(t,x)$	$\vec{q}(t,x,y,z)$
$q = -k\dfrac{\partial T}{\partial x}$	$\vec{q} = -k\nabla T$

Herleitung über Energiebilanz in V

Energie kann sich nur durch Energiequelle, -senke ändern oder sie kommt von aussen dazu.



Änderung der inneren Energie	=	Summe aller Wärmeflüsse $[W]$	+	Wärmeleistung $[W]$
$\frac{\partial}{\partial t} C_p \int_V \rho\ T\ dV$	=	$-\oint_A \dot{q} * \dot{n} * dA$	+	$\int_V Q\ dV$

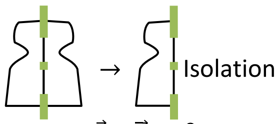
Randbedingungen

- Vorgabe T (Dirichlet)
- Heat Flux

$(n * \nabla T) = q_0 + h(T_\infty - T)$

q_0	Neumann
T_∞	Umgebung
$(T_\infty - T)$	Robin

- Symmetry



$\vec{q} * \vec{n} = 0$

Resultat

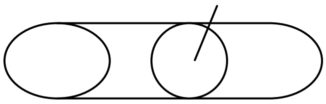
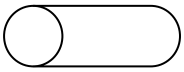
transient (=instationär) dreidimensionale WLG	stationäre dreidimensionale WLG
$\rho * C_p * \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla * (k * \nabla * T) = Q$	$-\nabla * (k * \nabla * T) = Q$

Falls $k\ =\ const$ $\quad \to \nabla(k\nabla T) = k * \Delta * T$

$\rho\ C \frac{\partial T}{\partial t} - k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) = Q$	$-k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) = Q$

$\Delta = laplace - operator$

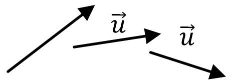
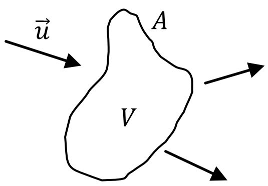
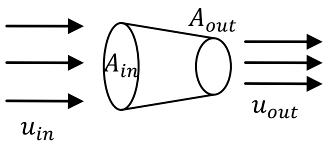
Idealisierungen

Ziel	Vereinfachte Simulation von • Langen Strukturen (fast 1D), wo sich der Querschnitt nicht ändert und T konstant über den Querschnitt ist. • Dünne flache Strukturen, die "fast 2D" sind.	
Beispiel	T=const, d.h. $T = T(t,x)$  h, T_∞ convective cooling	Ziel: DGL, die die Randbedingung der 3D-Situation berücksichtigt.
Lösung	Energiebilanz in 	

Änderung der inneren Energie	=	Summe aller Wärmeflüsse $[W]$	+	Quellen $[W]$
$m * C * \frac{\partial}{\partial t} T$	=	$von\ links - von\ rechts + über\ Umfang$	+	$Wärmequelle$
$\rho\ A\ dx * C * \frac{\partial}{\partial t} T$	=	$A\ q(t,x) - A\ q(t, x+dx) + h\ (T_\infty - T) U\ dx$	+	$Q\ A\ dx$

$$\rho\ C\ \frac{\partial}{\partial t} T - \frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial T}{\partial x}\right) = \underbrace{h \frac{U}{A}\ (T_\infty - T)}_{Quelle,\ die\ von\ T\ abhängt} + Q$$

2.4.1 Die Kontinuitätsgleichung

Massestrom (in Fluid)	$\rho\ \vec{u}$		$[\rho\ \vec{u}] = \frac{kg}{m^3} \frac{m}{s} = \frac{kg}{m^2 s}$
Massebilanz			Zeitliche Änderung der Masse in V = Summe aller Massenflüsse $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho\ dV = -\oint_A \rho\ \vec{u} * \vec{n}\ dA$ mit Gauss: $\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho\ dV = -\int_V \nabla * (\rho\ \vec{u})\ dV$
Kontinuitätsgleichung (Masseerhaltung)	Da das Volumen beliebig ist, folgt:		$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla * (\rho\ \vec{u}) = 0$
	Falls $\rho = const$ in Ort und Zeit:		$\nabla * (\vec{u}) = 0$
			$u_{in}\ A_{in} = u_{out}\ A_{out}$

2 Arten von Wärmeflüssen

Konduktion (Conductive)	$\vec{q} = -k \nabla T$	Schwingung auf Nachbarmoleküle
Konvektion (Convection) – Diffusion – Equation	$q_c = \rho \vec{u} C T$	Wärmetransport durch ein bewegtes Medium

2.4.2 WLG mit Konvektion

Gegeben	• Konduktion + Konvektion • $\rho = const$ • Strömungsgewschwindigkeit $\vec{u} = gegeben$	
Lösung	alt	$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla\ q = Q$
	neu	$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla * [-k \nabla T + \rho \vec{u} C T] = Q$
	Betrache	$\nabla \rho \vec{u} C T = \rho C\ \nabla(\vec{u} T)$
	Produktregel	$\rho C [(\nabla * u) T + u * \nabla T]$ $\nabla * u = 0 \rightarrow\ Masseerhaltung$ $\rightarrow \rho C u * \nabla T$
Resultat	**instationär**	**stationär**
	$\rho C \left[\frac{\partial T}{dt} + \vec{u} * \nabla T\right] - \nabla(k \nabla T) = Q$	$\rho C \vec{u} * \nabla T - \nabla(k \nabla T) = Q$

Wärmeleitung in Zylinderkoordinaten

$$\frac{\rho C\,\partial T}{\partial t} - k\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right] = Q$$

bei axiamler Symmetrie (Flasche):

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial \varphi^2} = 0$$

3. Strömungsmechanik

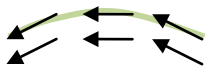
Fluid wird beschrieben durch:

- Geschwindigkeit $\vec{u}(t,x,y,z) = \begin{pmatrix} u(t,x,y,z) \\ v(t,x,y,z) \\ w(t,x,y,z) \end{pmatrix}$
- Dichte $\rho(t,x,y,z)$
- Druck $p(t,x,y,z)$
- Temperatur $T(t,x,y,z)$

Merke

stationär heisst: $\frac{\partial}{\partial t} \ldots = 0$

- Stromlinien



$\vec{u}(t,x,y,z)$

Geg: $\vec{u}(t,x,y,z)$

Stromlinie zur (festen) Zeit t ist eine Funktion $\vec{x}(s) = \begin{pmatrix} x(s) \\ y(s) \\ z(s) \end{pmatrix}$

mit $\frac{d\vec{x}}{ds} = \lambda\,\vec{u}(t,x,y,z)$

mit einem λ.

Materielle Ableitung

Es sei $f(t,x,y,z)$ eine Fluideigenschaft.
z.B. Temperatur, Konzentration
Wie ändert sich diese Eigenschaft für ein bestimmtes Fluidteilchen, dass sich mit dem Fluid bewegt.

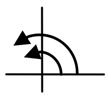
$$\frac{Df}{Dt} = \frac{d}{dt} f\big(t, x(t), y(t), z(t)\big)$$
$$= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{dx}\frac{\partial x}{dt} + \frac{\partial f}{dy}\frac{\partial y}{dt} + \frac{\partial f}{dz}\frac{\partial z}{dt}$$
$$= \frac{\partial f}{dt} + u\frac{\partial f}{\partial x} + v\frac{\partial f}{\partial y} + w\frac{\partial f}{\partial z}$$

Also:

$$\boxed{\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{dt} + (\vec{u} * \nabla) f}$$

Beispiel

$$T(x,y) = ax$$

Fall 1: $\vec{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial T}{dt} + (\vec{u} * \nabla)T$ $= 0 + \left(u\frac{\partial}{\partial x} + v\frac{\partial}{\partial y}\right) ax$ $= u\,a = a$
Fall 2: $\vec{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial T}{dt} + (\vec{u} * \nabla)T$ $= 0 + \left(u\frac{\partial}{\partial x} + v\frac{\partial}{\partial y}\right) ax$ $= 0 + (0\frac{\partial ax}{\partial x} + 1\frac{\partial ax}{\partial y}) = 0$
Beispiel  $\vec{u} = \omega * \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$	$\frac{D\vec{u}}{Dt} = (\vec{u} * \nabla)\omega\begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$ $= \left(u\frac{\partial}{\partial x} + v\frac{\partial}{\partial y} + w\frac{\partial}{\partial z}\right)\omega\begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$ $= \omega^2\left(-y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}\right)\begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} = \omega^2\begin{pmatrix} -x \\ -y \\ 0 \end{pmatrix}$

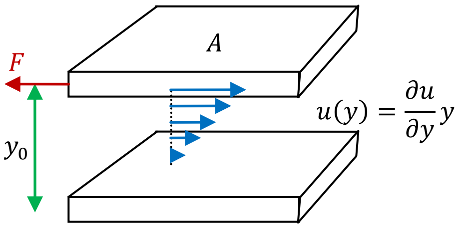
Der Operator $\frac{\partial}{\partial x}$ ist nur auf die Symbole rechts davon anwendbar.

$$u\frac{\partial}{\partial x}v = u * \frac{\partial v}{\partial x}$$

Navier-Stokes-Gleichung (10.12.2012)

Newtonsches Fluid

Experiment



$F = \eta\, A \frac{V}{y_0}$	η	dynamische Viskosität	$[\eta] = Pa\ s$

Idee:

$$\eta = const$$

Schubspannung

$$\tau = \eta * \frac{du}{dy}$$

Typische Werte

Schmierseife	$\sim 10^5 Pa\ s$
Öl	$\sim 1 Pa\ s$
Wasser	$\sim 10^{-3} Pa\ s$
Luft	$\sim 10^{-5} Pa\ s$

Herleitung

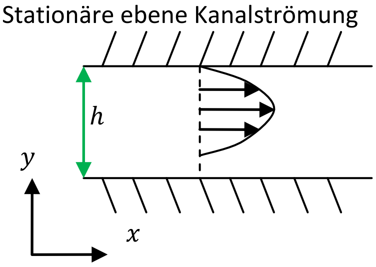
$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \eta\, \Delta\vec{u} - \nabla p + \rho\, \vec{g}$$

=Scherkräft-Druckkräft+Volumetrische Kraft

$$\nabla * \vec{u} = 0$$

Beispiel

Stationäre ebene Kanalströmung



$$u = u(y)$$
$$v = w = 0$$
$$u(0) = u(k) = 0$$

Lösung allgemein	**Lösung am Beispiel**
$\rho\left[\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{dx} + v\frac{\partial u}{dy} + w\frac{\partial u}{dz}\right] = \eta\left(\frac{\partial^2 u}{dx^2} + \frac{\partial^2 u}{dy^2} + \frac{\partial^2 u}{dz^2}\right) - \frac{\partial p}{dx}$ $\rho\left[\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{dx} + v\frac{\partial v}{dy} + w\frac{\partial v}{dz}\right] = \eta\left(\frac{\partial^2 v}{dx^2} + \frac{\partial^2 v}{dy^2} + \frac{\partial^2 v}{dz^2}\right) - \frac{\partial p}{dy}$ $\rho\left[\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{dx} + v\frac{\partial w}{dy} + w\frac{\partial w}{dz}\right] = \eta\left(\frac{\partial^2 w}{dx^2} + \frac{\partial^2 w}{dy^2} + \frac{\partial^2 w}{dz^2}\right) - \frac{\partial p}{dz}$ $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial}{\partial t} = 0, \quad da\ stationär$ $v = w = 0$ $\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad da = u(y)$ Also bleibt $\eta * \frac{\partial^2 u}{dy^2} = \frac{\partial p}{dx}, \quad (**) \rightarrow \frac{\partial^2 p}{dx^2} = 0$ $\rho\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \quad (*) \ \rightarrow p = p(x)$ $\frac{\partial p}{dx} = -K = const$ damit wird aus (**) $\frac{\partial^2 u}{dy^2} = \frac{1}{\eta}\frac{\partial p}{dx} = -\frac{K}{\eta}$ $u(y) = -\frac{K}{2\eta}y^2 + C_1 y + C_2$

also

Bestimme $C_1, C_2\ aus\ RB$

$$0 = u(0) = C_2$$

$$0 = u(h) = +\frac{h}{2\eta}K$$

$$\rightarrow u(y) = -\frac{K}{2\eta}y^2 + \frac{h}{2\eta}Ky$$

also

$$u(y) = K\frac{1}{2\eta}y(h-y)$$

-> Parabelförmiges Strögunsprofil!

Reynoldszahl

$$Re = \frac{\rho * U * L}{\eta}$$

gibt an, ob eine Strömung

laminar $Re < 2000$

oder

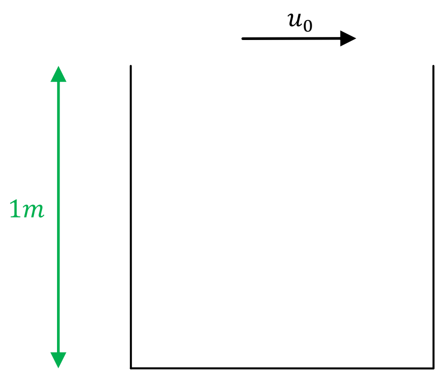
turbulent $Re \gg 2000$

ist

Gegeben

$$\rho = 1\frac{kg}{m^3}$$
$$\eta = 10^{-5} Pa\ s$$

Skizze



Lösung

$$Re = \frac{\rho\ L\ u_0}{\eta}$$
$$u_0 = Re\frac{\eta}{\rho L}$$