**Stefan BRAUN** 

# Wärme- und Stoffübertragung 2 (322.063)

Technische Universität Wien, Institut für Strömungsmechanik und Wärmeübertragung, Resselgasse 3/E322, 1040 Wien, Österreich Tel.: +43 (0)1 58801 32223, Email: stefan.braun@tuwien.ac.at, web: http://www.fluid.tuwien.ac.at/

19. Juni 2013

# Zusammenstellung der Grundgleichungen

partielle Massenbilanz:

$$\frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} + \vec{\nabla} (\vec{j}_{\alpha} + \rho_{\alpha} \vec{v}) = \sigma_{\alpha} , \qquad (1)$$

$$\rho \frac{\mathrm{D}c_{\alpha}}{\mathrm{D}t} = -\vec{\nabla}\vec{j}_{\alpha} + \sigma_{\alpha} \tag{2}$$

globale Massenbilanz:

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} = -\rho\,\vec{\nabla}\vec{v}\tag{3}$$

Impulsbilanz:

$$\rho \frac{\mathrm{D}v_j}{\mathrm{D}t} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma'_{ji}}{\partial x_i} + \rho g_j \tag{4}$$

Leistungsbilanz:

$$\rho\left(\frac{\mathrm{D}u}{\mathrm{D}t} - \frac{p}{\rho^2}\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t}\right) = \rho c_p \frac{\mathrm{D}T}{\mathrm{D}t} - \beta T \frac{\mathrm{D}p}{\mathrm{D}t} + \sum_{\alpha} h_{\alpha} \rho \frac{\mathrm{D}c_{\alpha}}{\mathrm{D}t} = \Phi - \frac{\partial q'_i}{\partial x_i},\tag{5}$$

$$\Phi = \sigma'_{ji} \frac{\partial v_j}{\partial x_i}, \quad q'_i = q_i + \sum_{\alpha} j_{\alpha i} h_{\alpha}$$
(6)

Entropiebilanz:

$$\rho \frac{\mathrm{D}s}{\mathrm{D}t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{q'_i}{T} - \frac{1}{T} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} j_{\alpha i} \right) + \rho \dot{\sigma}_s \tag{7}$$

$$\rho \dot{\sigma}_s = \frac{\Phi}{T} - \frac{q_i'}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{\alpha} j_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{\alpha}}{T}\right) - \frac{1}{T} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} \sigma_{\alpha} \ge 0$$
(8)

Gibbs Relation:

$$T \,\mathrm{d}s = \mathrm{d}u - \frac{p}{\rho^2} \,\mathrm{d}\rho - \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} \,\mathrm{d}c_{\alpha} \tag{9}$$

# Literatur

- [1] Abramowitz, M., Stegun, I.A.: Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications.
- [2] Baehr, H.D., Stephan, K.: Wärme- und Stoffübertragung, 7. Aufl., Springer, 2010.
- [3] Brauer, H.: Stoffaustausch, Sauerländer, 1971.
- [4] Crank, J.: The Mathematics of Diffusion, Oxford University Press, 1975.
- [5] Doetsch, G.: *Anleitung zum praktischen Gebrauch der Laplace-Transformation*, Oldenbourg, 1956.
- [6] Geankoplis, C.J.: Mass Transport Phenomena, Holt, Rinehart and Winston, Inc., 1972.
- [7] Gersten, K., Herwig, H.: Strömungsmechanik, Vieweg, 1992.
- [8] Häfner, F., Sames, D., Voigt, H.D.: Wärme- und Stofftransport, Springer, 1992.
- [9] Incropera, F.P., de Witt, D.P.: *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, John Wiley & Sons, 1985.
- [10] Jischa, M.: Konvektiver Impuls-, Wärme- und Stoffaustausch, Vieweg, 1982.
- [11] Landau, L.D., Lifschitz, E.M.: Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI Hydrodynamik, Akademie, 1991.
- [12] Lunardini, V.J.: Heat Transfer with Freezing and Thawing, Elsevier, 1991.
- [13] Mersmann, A.: Stoffübertragung, Springer, 1986.
- [14] Müller, I.: *Thermodynamics*, Pitman, 1985.
- [15] NIST Digital Library of Mathematical Functions, http://dlmf.nist.gov/ (17.4.2013).
- [16] Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell, J.P.: *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill Professional, 2000.
- [17] Schneider, W., Haas, S., Ponweiser, K.: *Repetitorium Thermodynamik*, Oldenbourg Verlag, 2012.
- [18] Skelland A.H.P.: Diffusional Mass Transfer, John Wiley & Sons, 1974.
- [19] Slattery, J.C.: Advanced Transport Phenomena, Cambridge University Press, 1999.
- [20] Welty, J.R., Wicks, C.E., Wilson, R.E.: *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer*, John Wiley & Sons, 1969.

# Grundlagen

- 1. Man betrachte den Stofftransport einer N-komponentigen Mischung.
  - (a) Gesucht ist der Zusammenhang zwischen Massenkonzentration c<sub>α</sub> = ρ<sub>α</sub>/ρ (Partialdichte ρ<sub>α</sub>, Gesamtdichte der Mischung ρ) und Molkonzentration (Molenbruch) X<sub>α</sub> = c̄<sub>α</sub>/c̄ (Partialmoldichte (Molarität) c̄<sub>α</sub>, Gesamtmoldichte der Mischung c̄) für die Komponente α (α = 1, · · · , N).
  - (b) Unter der Annahme, dass die einzelnen Komponenten  $\alpha$  der Mischung thermodynamisch durch die Zustandsgleichung eines idealen Gases beschrieben werden können, gebe man unter Verwendung des Daltonschen Gesetzes  $p = \sum_{\alpha=1}^{N} p_{\alpha}$  (Partialdruck  $p_{\alpha}$ , Gesamtdruck p der Mischung) den Zusammenhang zwischen Molkonzentration  $X_{\alpha}$ und Partialdruck  $p_{\alpha}$  an.
  - (c) Unter der Verwendung der in Pkt. (a) abgeleiteten Beziehung transformiere man die Konvektionsdiffusionsgleichung für ein Binärgemisch mit der Massenkonzentration als Veränderliche in eine entsprechende Gleichung mit der Molkonzentration als neuer Feldgröße.
  - (d) Man zeige unter der Annahme Fickscher Diffusion, dass der Diffusionskoeffizient für ein Binärgemisch für beide Komponenten identisch ist, d.h.  $D_{12} = D_{21} \equiv D$ .

## (Quasi-) stationäre Wärmeleitung und Diffusion

2. Gegeben sei eine in lateraler Richtung unendlich ausgedehnte, unbewegte Flüssigkeitsschicht mit der Dicke  $\delta$  (eindimensionales Problem). Man betrachte die stationäre, binäre Diffusion bei gegebenen Werten für die Gesamtdichte  $\rho = konst$ . und den Diffusionskoeffizienten D = konst. durch diese Schicht mit den Randbedingungen:

$$c(0) = c_0 = konst.,$$
  $c(\delta) = c_{\delta} = konst.$ 

Gesucht ist die Konzentrationsverteilung der Komponente 1 in der Schicht, sowie die Diffusionsstromdichte und der Diffusionswiderstand.

- 3. Man berechne den Diffusionswiderstand  $R_A$ , die Konzentrationsverteilung  $c_A$ , den Massestrom und die in der Zeit t diffundierte Stoffmenge  $Q_A$  der Komponente A unter den Voraussetzungen: binäre, stationäre Diffusion ohne chemische Reaktion,  $\rho$ ,  $D \dots konst$ . für folgende Festkörpergeometrien:
  - (a) Hohlzylinder (Innen-/Außen-Ø $2r_1/2r_2$ , Länge L)
  - (b) Hohlkugel (Innen-/Außen-Ø $2r_1/2r_2$ )

mit den Randbedingungen:

$$c_A(r_1) = c_{A1} = konst.,$$
  $c_A(r_2) = c_{A2} = konst.$ 

*Hinweis:* Schreiben Sie die Diffusionsgleichung in Zylinder- bzw. Kugelkoordinaten an und beachten Sie, dass aus Symmetriegründen die Konzentration nur vom Radius abhängt,  $c_A = c_A(r)$ .

4. Diffusion durch eine feste Wand.

Man betrachte die quasistationäre Diffusion aus einem gasgefüllten, kugelförmigen Behälter. Gegeben sei der Innenradius R und die Wandstärke  $\delta$  ( $\delta \ll R$ ) des Behälters, der Partialdruck der Gasfüllung  $p_A(t=0) = p_{A0}$ , der Diffusionkoeffizient D = konst., die Löslichkeit S des Gases in der Behälterwand und die Temperatur T = konst.; außerhalb des Behälters herrsche immer  $p_A = 0$ .

Bestimmen Sie näherungsweise den Druckabfall des (idealen) Gases im Behälter nach der Zeit $t. \label{eq:constraint}$ 

*Lösungshinweis:* man verwende die Massenbilanz in integraler Form für ein raumfestes Kontrollvolumen.

5. Diffusion mit chemischer Reaktion in eine unbewegte Schicht.

Gegeben sei eine Flüssigkeitsschichtanordnung über einer undurchlässigen Wand lt. Skizze (eindimensionales Problem). An der Kontaktfläche zwischen den Schichten herrsche die konstante Konzentration  $c_{A0}$ . Man betrachte die stationäre Diffusion der Komponente A in die Komponente B, dort findet eine chemische Reaktion 1. Ordnung statt.

Gesucht ist die Konzentrationsverteilung und die Massenstromdichte der Komponente A in der Fluidschicht B bei bekanntem  $\rho$ ,  $D \dots konst$ .



6. Einseitige Diffusion in eine unbewegte Fluidschicht.

(Heizkostenverteiler nach dem Verdunstungsprinzip)

Gegeben sei ein oben offener Behälter, welcher etwa bis zur Hälfte mit einer schwer siedenden Flüssigkeit der Dichte  $\rho_{AFl.}$  gefüllt ist. Man kann annehmen, dass die Flüssigkeit stationär verdampft und in die äußere Umgebung des Behälters diffundiert. An der Flüssigkeitsoberfläche (y = 0) herrsche die Massenkonzentration  $c_{A0}$ , am Gefäßrand  $(y = L) c_{AL}$ . Es sei  $\rho, D \dots$  konstant. Gesucht ist:

- (a) der Konzentrationsverlauf  $c_A(y)$   $0 \le y \le L$  unter der Annahme, dass der Massenstrom von außen in den Behälter vernachlässigbar klein ist.
- (b) die Massenstromdichte der aus dem Behälter verdampfenden Flüssigkeit.
- (c) die Flüssigkeitsspiegelabsenkung  $\delta$  nach der Zeit t (Voraussetzung  $\delta \ll L$ , sodass quasistationäre Verhältnisse für die Diffusion angenommen werden können).

### Instationäre Wärmeleitung und Diffusion

7. Instationäre Diffusion ohne chemische Reaktion in unbewegter Schicht.

Gegeben sei eine unendlich ausgedehnte Platte der Dicke L (eindimensionales Problem), in der der Stoff A zur Zeit t = 0 gleichmäßig mit der Massenkonzentration  $c_{A0}$  verteilt ist. Die Konzentration auf den Plattenoberflächen sei für alle Zeiten 0.

Berechnen Sie für  $\rho$ ,  $D \dots konst$ . die Konzentrationsverteilung  $c_A$  für  $0 \le x \le L$  und t > 0 des in die Umgebung ausdiffundierenden Stoffes.

*Hinweis:* lösen Sie die Diffusionsgleichung durch Variablentrennung mit Hilfe eines Produktansatzes.

8. Mischvorgang in einem thermisch isolierten Gefäß.

Zwischen zwei thermisch isolierenden, undurchlässigen Wänden (Abstand L) sind zwei ideale Gase A und B kostanter spezifischer Wärmekapazitäten durch eine dünne, undurchlässige Membran an der Stelle 0 < a < L getrennt. Zum Zeitpunkt t = 0 wird die Membran entfernt. Man bestimme unter der Voraussetzung  $\rho, T, p, D...konst$ .

(a) die Konzentrationsverteilung  $c_A(x,t)$  für  $0 \le x \le L, t > 0$ . *Hinweise:* lösen Sie die Diffusionsgleichung mit Hilfe eines Separationsansatzes und superponieren Sie zusätzlich die offensichtliche Lösung  $\alpha + \beta x$ , mit  $\alpha, \beta \dots konst$ .

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(n\theta)}{n} = \frac{\pi - \theta}{2}, \quad 0 < \theta < 2\pi,$$

(b) die Entropieproduktionsdichte  $\dot{\sigma}_s(x,t)$  sowie die Mischentropie. *Hinweise:* für Gemische idealer Gase gilt (siehe auch Bsp. 1):

$$\rho u = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} u_{\alpha}, \quad u_{\alpha} = c_{v\alpha} T + u_{\alpha 0},$$
  

$$\rho s = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} s_{\alpha}, \quad s_{\alpha} = c_{v\alpha} \ln T - R_{\alpha} \ln \rho_{\alpha} + s_{\alpha 0},$$
  

$$\rho \mu = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mu_{\alpha}, \quad \mu_{\alpha} = u_{\alpha} - T s_{\alpha} + \frac{p_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}.$$

9. Diffusion in ruhender Schicht endlicher Dicke.

Man betrachte das instationäre Ausdiffundieren eines Stoffes A aus einer unendlich ausgedehnten Platte der Dicke L in die Umgebung (eindimensionales Problem). Die Massenkonzentrationsverteilung  $c_A$  zur Zeit t = 0 sei f(x) für 0 < x < L, die Konzentration auf den Grenzflächen sei

$$c_A(0,t) = c_{A0} = konst.,$$
  $c_A(L,t) = c_{AL} = konst.$ 

Gesucht: Konzentrationsverteilung  $c_A(x, t)$  für 0 < x < L, t > 0 für  $\rho, D \dots konst$ .

*Hinweis:* lösen Sie die Diffusionsgleichung mit Hilfe eines Separationsansatzes und superponieren Sie zusätzlich die offensichtliche Lösung  $\alpha + \beta x$  ( $\alpha, \beta \dots konst$ .). 10. Auflösen eines Festkörpers in einer Flüssigkeitsschicht.

Ein Salzblock der Massendichte  $\rho_s$  wird zum Zeitpunkt t = 0 mit einer *reinen* Wasserschicht der Dicke L in Kontakt gebracht. An der Grenzfläche Salz/Wasser x = 0 herrscht ab diesem Zeitpunkt Sättigungsdichte  $\rho_0$ , der Boden x = L ist sowohl für Wasser, als auch für Salz *undurchlässig*. Die Wasserschicht ist gegenüber typischen Salzblockabmessungen dünn, das Problem kann daher näherungsweise eindimensional behandelt werden (s. Skizze). Man bestimme für die gegebenen (konstanten) Größen  $\rho_s$ ,  $\rho_0$ , L, D

- (a) die Salzdichteverteilung  $\rho_f(x, t)$  in der Wasserschicht für  $t \ge 0$ ,
- (b) die maximale Salzmenge, die pro Flächeneinheit in die Wasserschicht eingebracht werden kann und die damit verbundene Schichtdickenabnahme  $\Delta L$  des Salzblockes.

*Hinweise:* Lösen Sie die instationäre Diffusionsgleichung mit Hilfe eines Produktansatzes und superponieren Sie zur allgemeinen Lösung die triviale Lösung  $\alpha + \beta x$ . Man verwende weiters die Orthogonalitätsrelation sowie die Summenformel



#### 11. Einfaches Modell eines Gasfeuerzeuges.

Um aus einem Gasfeuerzeug bei Betrieb einen konstanten Gasstrom (also eine bestimmte Flammengröße) zu gewährleisten, ist zwischen Ventil und Gastank eine durchlässige Membran eingebaut. An deren innerer Oberfläche herrscht unabhängig von der Feuerzeuglage die konstante Konzentration  $c_A(L,t) = Sp_A$ , S ist hierbei die Löslichkeit des Gases an der Membranoberfläche und  $p_A$  der konstante Gasdruck im Feuerzeug. An der Ventilseite der Membran ist die Konzentration ab dem Öffnungs- und Zündzeitpunkt t = 0 durch die Verbrennungsreaktion immer  $c_A(0,t) = 0$ . Bald nach Inbetriebnahme stellt sich der gewünschte Gasstrom  $j_{\infty}$  ein, was sich hier (vereinfacht) so ausdrückt:  $\vec{j}(0, t \to \infty) = -j_{\infty}\vec{e_x}$ . Unter der Annahme von  $\rho$ , D = konst. sowie eindimensionaler Betrachtung berechne man die Konzentrationsverteilung in der Membran  $c_A(x, t)$  und die nötige Membrandicke L. *Hinweise:* Lösen Sie die Diffusionsgleichung mit Hilfe eines Produktansatzes und superponieren Sie zur allgemeinen Lösung  $\alpha + \beta x$ .

$$\int_{0}^{L} \sin \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{m\pi x}{L} \, \mathrm{d}x = \frac{L}{2} \, \delta_{nm} \,, \qquad \delta_{nm} = \begin{cases} 1 \,, & n = m \,, \\ 0 \,, & n \neq m \,. \end{cases}$$

12. Bioreaktor.

In einem Bioreaktor werden Zellkulturen durch eine Nährlösung versorgt, welche aus einer einsetzbaren Trägerplatte der Dicke L instationär ausdiffundiert (eindimensional ebenes Problem). Der Stoffwechsel der Zellkulturen hält die Konzentrationen  $c_1$  und  $c_2$  auf beiden Seiten der Platte konstant. Zum Einsetzzeitpunkt t = 0 ist die Nährlösungskonzentration in der Platte  $konst = c_0 > c_2 > c_1$  (Skizze). Die Gesamtdichte  $\rho$  und der Diffusionskoeffizient D sind als konstant anzunehmen.

Bestimmen Sie für t > 0 die Konzentrationsverteilung c(x, t) in der Platte  $0 \le x \le L$  und geben Sie ein Kriterium zur Berechnung jenes Zeitpunktes an, bei dem die Versorgungsfunktion nicht mehr gewährleistet und ein Plattenaustausch erforderlich ist.

*Hinweis:* Lösen Sie die Diffusionsgleichung mit Hilfe eines Produktansatzes und superponieren Sie zur allgemeinen Lösung  $\alpha + \beta x$ .



13. Eindimensionale, instationäre Diffusion im unbegrenzten Raum. Man verifiziere, dass

$$\rho_A(x,t) = \frac{C}{\sqrt{t}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right], \quad t > 0, \quad x \in (-\infty,\infty), \quad C, x' \dots \text{fest}$$

(Fundamental-) Lösung der Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2}$$

ist. Diese Lösung beschreibt die binäre Diffusion des Stoffes A aus einer unendlich dünnen Schicht, welche sich an der Stelle x' befindet, für t > 0 ( $\delta$ -förmige Verteilung).

(a) man bestimme die Konstante C unter der Annahme, dass ursprünglich pro Flächeneinheit die Masse  $m_A$  (Dimension kg/m<sup>2</sup>) des Stoffes A in der Schicht verteilt war. *Hinweis:* Massenerhaltung für alle Zeiten t > 0 beachten!

- (b) man superponiere die Fundamentallösung so, dass die Diffusion für beliebige Anfangsverteilungen  $\rho_A(x, 0) = \rho_{A0}(x)$  für t > 0 beschrieben werden kann.
- (c) die unter (b) gefundene Lösung verwende man dazu, die Partialdichteverteilung  $\rho_A(x, t)$ , t > 0 für folgende Anfangsverteilung zu bestimmen:

$$\rho_A(x,0) = \begin{cases} \rho_{A0} = konst., & x \le 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases}$$

14. Instationäre, eindimensionale Diffusion aus einer Schicht im unbegrenzten Raum. Man bestimme die Konzentrationsverteilung  $c_A(x,t)$ , t > 0,  $x \in (-\infty, \infty)$  für folgende Anfangsverteilung:

$$c_A(x,0) = \begin{cases} c_{A0} = konst., & |x| \le a, \quad a > 0, \\ 0, & \text{sonst}, \end{cases}$$

mit  $\rho$ ,  $D \dots konst$ .

Welchen Wert nimmt  $c_A(x, t)$  für  $t \to \infty$  an?

Hinweis: man verwende das Ergebnis von Bsp. 13b.

 Instationäre, eindimensionale Diffusion im Halbraum. Man betrachte die eindimensionale, instationäre Diffusion im halbunendlichen Raum mit den Anfangs-/Randbedingungen

$$\rho_A(x,0) = \rho_{A1} = konst. \qquad x > 0$$
  
$$\rho_A(0,t) = \rho_{A0} = konst. \qquad t \ge 0$$

Gesucht ist die Partialdichteverteilung  $\rho_A(x,t)$  für t > 0, x > 0 unter der Voraussetzung  $\rho, D \dots konst.$ 

Hinweis: man verwende als Lösungsmethode die Laplace-Transformation

$$\tilde{\rho}_A(x,p) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-pt} \rho_A(x,t) \,\mathrm{d}t \,.$$

16. Eindimensionale, instationäre Diffusion mit chemischer Reaktion 1. Ordnung im Halbraum. Man berechne unter der Voraussetzung  $\rho$ , D = konst. für die folgende Situation die Massenkonzentrationsverteilung  $c_A(x,t)$  für x > 0, t > 0:

$$c_A(x,0) = 0, \quad x > 0,$$
  
 $c_A(0,t) = c_{A0} = konst., \quad t \ge 0,$   
 $\sigma_A(x,t) = -k_1 c_A(x,t), \quad x > 0, \ k_1 = konst$ 

Hinweis: Methode der Laplace-Transformation.

17. Absorber.

Man betrachte das eindimensionale Modell eines Katalysators: ein konstanter Stoffstrom

der Komponente A,  $j_A(0, t > 0) = j_{A0} = konst$ . wird von einem Katalysatormaterial, das den positiven x-Halbraum ausfüllt, ab dem Zeitpunkt t = 0 aufgenommen. Bis dahin sei die Stoffkonzentration  $c_A(x \ge 0, 0) = 0$ . Stoff A wird nach einer chemischen Reaktion 1. Ordnung  $\sigma_A(x,t) = -k_1c_A(x,t)$  abgebaut. Man berechne unter der Annahme  $\rho, D = konst$ .

- (a) die Konzentration  $c_A(x, t)$  im Katalysator für t > 0,
- (b) jene Strecke L, nach der der Stoffstrom im stationären Betrieb  $(t \to \infty)$  auf  $j_{A0}/2$  abgesunken ist.

*Hinweise:* Man verwende die Methode der Laplace-Transformation und berücksichtige die Randbedingung  $c_A(x \to \infty, t) = 0$ . Für die Rücktransformation verwende man (a und b bezeichnen Konstanten):

$$\tilde{f}(s) = \frac{e^{-x\sqrt{s/a+b}}}{s\sqrt{s/a+b}} \to f(t) = \frac{1}{2\sqrt{b}} \left[ e^{-x\sqrt{b}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4at}} - \sqrt{abt}\right) + e^{x\sqrt{b}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4at}} + \sqrt{abt}\right) \right],$$
$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z), \quad \operatorname{erf}(-z) = -\operatorname{erf}(z)$$

18. Auflösen einer Salzschicht in Wasser (eindimensionales Problem).

Eine feste Salzschicht der Dicke L und der Dichte  $\rho_{Ss}$  löst sich in der darüberliegenden (halbunendlichen) Wasserschicht. Die Partialdichte des Salzes an der Grenzfläche Salz-Wasser sei  $\rho_S(0,t) = \rho_{S0} = konst$ . für  $t \ge 0$ , und im Wasser  $\rho_S(x,0) = 0$  zum Zeitpunkt t = 0 für x > 0.

Gesucht ist

- (a) die Partialdichteverteilung  $\rho_S(x,t)$  des Salzes im Wasser für x > 0, t > 0 unter der Voraussetzung  $\rho, D \dots konst$ .
- (b) die Salzschichtdickenabnahme  $\Delta L$  nach der Zeit *t*. *Hinweis:* Ableitung der Fehlerfunktion, Abramowitz & Stegun [1]:

$$\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}z^{n+1}}\operatorname{erf}(z) = (-1)^n \frac{2}{\sqrt{\pi}} H_n(z) e^{-z^2}$$

 $H_n(z)$  ... Hermite-Polynome;  $H_0(z) = 1$ ,  $H_1(z) = 2z$ , ...

19. Langsames Auflösen einer Kugel.

Gegeben sei eine Kugel (Stoff *A*) mit Radius *R* und der Dichte  $\rho_{As}$ . An ihrer Oberfläche herrsche die Partialdichte  $\rho_A(R, t) = \rho_{A0} = konst$ . Zum Zeitpunkt t = 0 wird die Kugel in ein unendlich ausgedehntes Medium (Stoff *B*) gebracht, in dem schon Stoff *A* gelöst ist, also  $\rho_A(r, 0) = \rho_{A1}$  für r > R. Man berechne

- (a) die Partialdichteverteilung des Stoffes A,  $\rho_A(r,t)$  für r > R, t > 0 unter der Voraussetzung  $\rho, D \dots konst$ . mit Hilfe der Laplace-Transformation.
- (b) die Radiusabnahme  $\Delta R(t)$  der Kugel für  $\Delta R \ll R$ . Man vergleiche das Resultat für  $R \to \infty$  mit dem aus Bsp. 18.

20. Instationäre Diffusion in eine Kugel.

Eine Kugel vom Radius R und der Anfangsverteilung des Stoffes A,  $\rho_A(r, 0) = f(r)$  für r < R wird zum Zeitpunkt t = 0 in eine Lösung des Stoffes A mit der Partialdichte  $\rho_A(r, t) = \rho_{A0} = konst$ . für  $r \ge R$ , t > 0 gehängt.

- (a) man berechne die Partialdichteverteilung  $\rho_A(r,t)$  für r < R und t > 0 unter der Voraussetzung  $\rho, D \dots konst$ .
- (b) man spezialisiere das Ergebnis aus (a) für folgende Anfangsverteilung:

 $\rho_A(r, 0) = \rho_{A1} = konst.$  für  $0 \le r < R$ .

### Konvektiver Wärme- und Stoffübergang

21. Erstarrung bzw. Schmelzen eines Reinstoffes (Stefan-Problem).

Eine Flüssigkeit (Schmelze) der Temperatur  $T_0 > T_e$  erfülle den Halbraum x > 0,  $T_e$  bezeichnet die Erstarrungs- bzw. Schmelztemperatur. Zum Zeitpunkt t = 0 wird an der Begrenzungswand x = 0 die Temperatur schlagartig auf  $T_1 < T_e$  abgesenkt (s. Skizze). Die Flüssigkeit beginnt folglich an der Begrenzungswand zu erstarren, eine ebene Erstarrungsfront läuft in positive x-Richtung. Unter der Annahme inkompressibler Verhältnisse und Vernachlässigung von natürlicher Konvektion (Auftriebseffekten) bestimme man für gegebene (konstante) Materialparameter (Index s für fest, f für flüssig): Dichten  $\rho_s$ ,  $\rho_f$ , spezifische Wärmekapazitäten  $c_s$ ,  $c_f$ , Wärmeleitfähigkeiten  $\lambda_s$ ,  $\lambda_f$  und der spezifischen Erstarrungsbzw. Schmelzenthalpie  $h_e$ 

- (a) die Temperaturverteilung in der festen Phase, die Position h(t) und die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $\dot{h}$  der Phasengrenzfläche,
- (b) jene Geschwindigkeit, mit der sich die flüssige Phase bewegt sowie die dort herrschende Temperaturverteilung.
- (c) Man spezialisiere die Ergebnisse für Wasser bei  $T_0 = 278 \text{ K}, T_e = 273 \text{ K}, T_1 = 268 \text{ K}$ :  $\rho_s = 920 \text{ kg/m}^3, \quad c_s = 2100 \text{ J/(kg K)}, \quad \lambda_s = 2.219 \text{ J/(m s K)},$   $\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3, \quad c_f = 4187 \text{ J/(kg K)}, \quad \lambda_f = 0.6028 \text{ J/(m s K)},$  $h_e = 3.338 \times 10^5 \text{ J/kg}.$



22. Stationärer Wärme- und Stoffübergang bei aerodynamischen Anwendungen (hohen Reynolds-Zahlen).

An einem (z.B. porösen) Bauteil der charakteristischen Länge  $\tilde{L}$ , Breite  $\tilde{b} \gg \tilde{L}$  und der Temperatur  $\tilde{T}_w$ , welches mit konstanter Geschwindigkeit  $\tilde{u}_\infty$  von Luft (Dichte  $\tilde{\rho}_\infty$ , dynamische Viskosität  $\tilde{\mu}_\infty$ , Temperatur  $\tilde{T}_\infty$ , Wasserkonzentration  $c_\infty$ ) überströmt wird, verdunstet Wasser (~ bezeichnet dimensionsbehaftete Größen). Für den praktisch wichtigen Fall hoher Reynolds-Zahlen

$$Re = \frac{\tilde{\rho}_{\infty}\tilde{u}_{\infty}\tilde{L}}{\tilde{\mu}_{\infty}} \gg 1$$

betrachte man den konvektiven Impuls-, Wärme- und Stoffübergang:

- (a) ausgehend von den Grundgleichungen für stationäre, inkompressible, laminare Strömung leite man unter der Annahme ebener Verhätnisse ( $\tilde{b} \gg \tilde{L}$ ) die *Prandtlschen Grenzschichtgleichungen* für die Impuls-, Wärme- und Stoffübertragung in dimensionsloser Darstellung (Identifikation dimensionsloser Kennzahlen) ab und gebe die Voraussetzungen für die Analogie von Wärme- und Stoffübertragung an,
- (b) man unterziehe die Gleichungen einer Ähnlichkeitstransformation für sogenannte Keilströmungen (*Falkner-Skan-Ähnlichkeitslösungen*) unter der Annahme konstanter Stoffwerte und bestimme den Wärme- und Stoffübergang in Form der Nusselt-Zahl Nu und der Sherwood-Zahl *Sh*. Wie lautet die wandnormale Geschwindigkeitskomponente  $v_w$ unter der Annahme einseitiger Diffusion und konstanter Oberflächenkonzentration  $c_w$ ?
- (c) man spezialisiere das Ergebnis auf den Fall der Strömung um eine nichtangestellte, dünne Platte (*Blasius Grenzschicht*),
- (d) man berechne für die Plattenströmung die pro Zeiteinheit verdunstete Wassermenge (*i*) ohne und (*ii*) mit Berücksichtigung von  $v_w$  in der Grenzschichtrechnung (Störansatz für kleine  $v_w$  in (*ii*)).
- 23. Platten-Stoffkonvektor.

Über eine mit der Geschwindigkeit  $\tilde{u}_{\infty} = 1 \text{ m/s}$  längsangeströmten Platte (Skizze) der Länge  $\tilde{L} = 1 \text{ m}$  und Breite  $\tilde{B} = 5 \text{ m}$  wird Luft in einer Klimaanlage befeuchtet. Man bestimme mit Hilfe des aus der Theorie laminarer Grenzschichten ermittelten Ausdruckes für den lokalen Stoffübergang an der Plattenwand (*Eckert-Schneider-Beziehung*)

$$v_w(x) = \frac{\Delta c_{AB}}{Sc (1 - c_{Aw})} \frac{1}{\sqrt{2x}} \left(-\hat{\varphi}'_w\right) \qquad (dimensional os!)$$

die in einer Minute an die Umgebung abgegebene Wassermenge, wenn an der Plattenwand die Sättigungskonzentration  $c_{Aw} = 0.026$  aufrecht erhalten wird und die ankommende Luft vollkommen trocken ist ( $\Delta c_{AB}$  ... typische Konzentrationsdifferenz). Für den Konzentrationsgradienten an der Wand  $-\hat{\varphi}'_w$  in Ahängigkeit der Schmidt-Zahl *Sc* findet man aus numerischen Rechnungen:

Weiters sind gegeben: dynamische Zähigkeit  $\tilde{\mu} = 1.82 \times 10^{-5} \text{ Pa s}$ , Dichte  $\tilde{\rho} = 1.18 \text{ kg/m}^3$ , Difussionskoeffizient  $\tilde{D} = 2.2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ .

*Hinweise:* mit Tilde bezeichnete Größen sind dimensionsbehaftet. Grenzschichtskalierung  $v_w = \sqrt{Re} \tilde{v}_w / \tilde{u}_\infty$  beachten, 2 Plattenseiten!



24. Handtuchtrocknen.

Ein feuchtes Handtuch der Länge  $\tilde{L} = 1.5 \,\mathrm{m}$  und Breite  $\tilde{B} = 0.6 \,\mathrm{m}$  wird in ruhender, trockener Luft der Temperatur  $\tilde{T}_{\infty} = 25^{\circ}\mathrm{C}$  senkrecht aufgehängt (Skizze). Der Trocknungsprozess in Form von natürlicher Konvektion kühlt das Handtuch auf die zeitlich konstante Temperatur  $\tilde{T}_w = 15^{\circ}\mathrm{C}$ , an der Oberfläche herrscht dabei die Sättigungskonzentration  $c_w = 0.01$ . Die für den Stoff- und Wärmeübergang relevanten Größen innerhalb der Konvektionsgrenzschicht sind: Gesamtdichte  $\tilde{\rho} = 1.2 \,\mathrm{kg/m^3}$ , Diffusionskonstante  $\tilde{D} = 2.5 \times 10^{-5} \mathrm{m^2/s}$ , kinematische Zähigkeit  $\tilde{\nu} = 1.5 \times 10^{-5} \mathrm{m^2/s}$ , Wärmeleitfähigkeit  $\tilde{\lambda} = 2.58 \times 10^{-2} \mathrm{W/(m \, K)}$ , spezifische Wärmekapazität  $\tilde{c}_p = 1005 \,\mathrm{J/(kg \, K)}$ , Erdbeschleunigung  $\tilde{g} = 9.81 \,\mathrm{m/s^2}$ . Man berechne

(a) die Trocknungszeit  $\tilde{t}_T$  mit Hilfe der unten angegebenen Formeln und der Annahme, dass das Handtuch ursprünglich mit  $\tilde{m} = 0.3 \text{ kg}$  Wasser gleichmäßig getränkt ist. Für den Stoff- bzw. Wärmeübergang für *eine* (!) Handtuchseite gilt

$$\begin{cases} Sh \\ Nu \end{cases} = 1.078 + 0.406 \, |Ra|^{1/4} + 0.040 \, |Ra|^{1/3} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad 10 < |Ra| < 10^{12} \,, \quad Ra = Gr \times \begin{cases} Sc \\ Pr \end{cases} \,, \quad Sc \in Sr \ Ra \end{cases} \,, \quad Sc \in Sr \ Ra$$

dabei sind *Sh*, *Nu*, *Ra*, *Gr*, *Sc* und *Pr* die Sherwood-, Nusselt-, Rayleigh-, Grashof-, Schmidt- und Prandtl-Zahl. Die Grashof-Zahl, welche bei natürlicher Konvektion die Bedeutung der Reynolds-Zahl übernimmt, ist definiert durch

$$Gr = rac{ ilde{g} ilde{L}^3}{ ilde{
u}^2} \left( rac{ ilde{T}_w}{ ilde{T}_\infty} - 1 
ight).$$

(b) die Wärmestromdichte  $\tilde{q}_w$ , welche durch die natürliche Konvektion hervorgerufen wird und die notwendige Wärmestromdichte  $\tilde{q}_s$  der Sonneneinstrahlung (einseitig!), um das Handtuch auf der angegebenen Temperatur  $\tilde{T}_w$  zu halten. Die Enthalpiebilanz für die Anordnung lautet

$$\frac{\mathrm{d}\hat{H}}{\mathrm{d}\tilde{t}} = \tilde{C} \frac{\mathrm{d}\hat{T}_w}{\mathrm{d}\tilde{t}} = (2\tilde{q}_w + \tilde{q}_s)\tilde{L}\tilde{B} - \tilde{m}\tilde{h}_r \;,$$

wobei  $\tilde{C}$  die Gesamtwärmekapazität des Handtuches,  $\tilde{m}$  den verdunstenden Wassermassenstrom und  $\tilde{h}_r = 2256.5 \text{ kJ/kg}$  die spez. Verdampfungsenthalpie von Wasser bezeichnen. Ist die Sonneineinstrahlung ausreichend? (Solarkonstante  $\tilde{S} \approx 1 \text{ kW/m}^2$ ). *Hinweis:* für die Bilanz überlege man sich die richtige Wahl der Vorzeichen der Wärmeströme!



25. Laminarer Rieselfilm.

Man betrachte die ausgebildete Rieselfilmströmung lt. Skizze. Innerhalb der Länge L diffundiert Stoff aus der Wand- bzw. der Gasumgebung in den Film. Gesucht ist:

- (a) die Geschwindigkeitsverteilung im Rieselfilm.
- (b) die Konzentrationsverteilung im Film beim Stoffübergang Wand/Film unter der Annahme, dass die Eindringtiefe klein gegenüber der Filmdicke  $\delta$  ist und an der Wand die konstante Konzentration  $c_{A0}$  herrsche.

Hinweis: Aufsuchen einer Ähnlichkeitslösung mittels Dimensionsanalyse.

- (c) der Stoffübergang an der Wand in dimensionsloser Formulierung über die Sherwood-Zahl Sh = Sh(Re, Sc) in Abhängigkeit der Reynolds- und Schmidt-Zahl. Die *Re*-Zahl sei mit der mittleren Strömungsgeschwindigkeit gebildet.
- (d) die Konzentrationsverteilung im Film beim Stoffübergang Gas/Film unter der Annahme, dass die Eindringtiefe der in den Film diffundierenden Komponente klein ist, und an der Filmoberfläche konstante Konzentration  $c_{A0}$  herrsche.
- (e) der Stoffübergang an der Film/Gas Grenzfläche in der Form Sh = Sh(Re, Sc). Die *Re*-Zahl sei mit der Randgeschwindigkeit  $u_{max}$  gebildet.



26. Konvektiver Stoffübergang in einem Rohr. Durch ein Rohr wird eine zweikomponentige Flüssigkeit geführt, deren Komponente A über die Rohrwand weitgehend entfernt werden soll. Vor dem Stofftauscher der Länge L ist die entsprechende Partialdichte  $\rho_{A0}$ , nachher im Mittel  $\bar{\rho}_{A\infty}$ . An der aktiven Oberfläche ist die Partialdichte  $\rho_{Aw} = 0$  (s. Skizze).

Man bestimme für gegebenen Flüssigkeitsvolumenstrom  $\dot{V}$  und Diffusionskoeffizienten D die Länge L des Stofftauschers, wenn  $\bar{\rho}_{A\infty} = \alpha \rho_{A0}$  mit  $\alpha < 1$  erreicht werden soll und unter Annahme laminarer Rohrströmung das Stoffübergangsgesetz in Form der mit dem Rohrdurchmesser d gebildeten globalen Sherwood-Zahl

$$Sh_d = 1.615 \left( \text{Re Sc} \, \frac{d}{L} \right)^{1/3}$$

lautet. Schreiben Sie das Ergebnis ausschließlich in den gegebenen Größen  $\dot{V}$ , D und  $\alpha$  an!



27. Auflösen einer Kugel in ruhender und bewegter Atmosphäre. In einem ruhenden Medium sei die stationäre Konzentrationsverteilung um eine sich auflösende Kugel durch  $c_A(r) = c_{Aw}R/r$  gegeben. R ist dabei der Kugelradius,  $c_{Aw}$  die an der Oberfläche herrschende Sättigungskonzentration. Wird die Kugel hingegen mit einer konstanten Geschwindigkeit *u* angeströmt, findet man (unter den Voraussetzungen für die Reynolds-Zahl Re < 800 und Schmidt-Zahl  $0.6 \le Sc \le 2.7$ ) für den Stoffübergang zwischen Kugel und Umgebung den halbempirischen Zusammenhang

$$Sh = 2 + 0.552 Re^{1/2} Sc^{1/3}$$

Man bestimme für gegebene Größen  $\rho$ , D,  $\nu = konst.$ , R und  $c_{Aw}$ 

- (a) die Sherwoodzahl  $Sh_0$  für den Fall der ruhenden Umgebung (u = 0),
- (b) die in der Zeit  $\Delta t$  von der Kugel abgegebene Stoffmenge  $Q_A$  für beide Fälle. Diskutieren Sie den Stoffübergang an der angeströmten Kugel im Grenzfall  $u \to 0$ .
- 28. Verdunstung eines fallenden Tropfens.

Ein kleiner kugelförmiger Wassertropfen fällt unter Einwirkung der Schwerkraft durch ruhende, trockene Luft der Dichte  $\rho$ , dabei verdunstet er näherungsweise isotherm. Setzt man schleichende Strömung  $Re \ll 1$  voraus, hält sich die Stokessche Widerstandskraft  $F_w = 6\pi\mu Ru$  und die Gewichtskraft G (Wasserdichte  $\rho_w$ ) des Tropfens in jedem Zeitpunkt t die Waage. Hier bedeuten  $\mu$  die dynamische Viskosität von Luft, R(t) der momentane Tropfenradius und u(t) die Tropfenfallgeschwindigkeit. An der Tropfenoberfläche herrscht Sättigungskonzentration  $c_w$ , der Stoffübergang wird durch das semiempirische Gesetz

$$Sh = 2\left(1 + 0.276 \, Re^{1/2} \, Sc^{1/3}\right)$$

beschrieben, wobei Sh, Re und Sc die Sherwood-, Reynolds- und Schmidt-Zahl bezeichnen.

(a) Geben Sie das zeitliche Verhalten des Tropfenradius' in Form einer Differentialgleichung an.

*Hinweis:* man stelle einen Zusammenhang zwischen der zeitlichen Abnahme der Tropfenmasse und der Verdunstungsstromdichte an der Oberfläche her.

(b) Berechnen Sie jene Zeit t\*, die vergeht, bis der Tropfen mit dem ursprünglichen Radius R<sub>0</sub> = R(t = 0) vollständig verdunstet ist. Luftdichte ρ = 1.2 kg/m<sup>3</sup>, kinematische Zähigkeit ν = 1.5 × 10<sup>-5</sup>m<sup>2</sup>/s, Diffusionskoeffizient D = 2.5 × 10<sup>-5</sup>m<sup>2</sup>/s, Wasserdichte ρ<sub>w</sub> = 1000 kg/m<sup>3</sup>, R<sub>0</sub> = 0.2 mm, c<sub>w</sub> = 0.026. *Hinweis:* 

$$\int \frac{x}{1+ax^{3/2}} \, \mathrm{d}x = \frac{2\sqrt{x}}{a} - \frac{2}{\sqrt{3}a^{4/3}} \arctan\left(\frac{2a^{1/3}\sqrt{x}-1}{\sqrt{3}}\right) - \frac{2}{3a^{4/3}}\ln\left(1+a^{1/3}\sqrt{x}\right) + \frac{1}{3a^{4/3}}\ln\left(1-a^{1/3}\sqrt{x}+a^{2/3}x\right) + konst.$$

## Lösungen

1.(a)

Massenkonzentration:  $c_{\alpha} = \frac{\rho_{\alpha}}{\rho},$  $\rho_{\alpha} \dots$  Partialdichte der Komponente  $\alpha$ ,

 $\rho = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \dots \text{Gesamtdichte der } N\text{-komponentigen Mischung } (\alpha = 1, \dots, N),$ Nebenbedingung  $\sum_{\alpha} c_{\alpha} = 1$ Atommasse, Molekülmasse:  $m_{M\alpha} = \mathcal{M}_{\alpha} \text{ u}$ 

 $\mathcal{M}_{\alpha}$  ... relative Atom- bzw. Molekülmasse (z.B. natürlich vorkommender Kohlenstoff:  $\mathcal{M}_{C} \approx 12.011$ )

u ... atomare Masseneinheit,  $1 \text{ u} := 1.660538921 \cdot 10^{-27} \text{ kg};$ 1 u entspricht 1/12 der Masse eines isolierten Atoms des Kohlenstoff-Isotops <sup>12</sup>C im Grundzustand

Molmasse:  $M_{\alpha} = \mathcal{A} m_{M\alpha}$ 

 $\mathcal{A}$  ... Avogadro-Konstante,  $\mathcal{A} = 6.022\,141\,29 \cdot 10^{23}$  Moleküle/mol

Massenanteil der Komponente  $\alpha$ : n

$$n_{\alpha} = N_{\alpha} M_{\alpha} \qquad \left| \cdot \frac{1}{\Delta V} \right|$$

 $N_{\alpha}$  ... Molzahl (Definition der Stoffmenge, mol, kmol)

$$\underbrace{\lim_{\Delta V \to 0} \frac{m_{\alpha}}{\Delta V}}_{\rho_{\alpha}(\vec{r}, t)} = M_{\alpha} \underbrace{\lim_{\Delta V \to 0} \frac{N_{\alpha}}{\Delta V}}_{\bar{c}_{\alpha}(\vec{r}, t)}$$

 $\bar{c}_{\alpha}$  ... *Moldichte* oder *Molarität*,  $\bar{c} = \sum_{\alpha} \bar{c}_{\alpha}$  ... Gesamtmolarität der Mischung

$$\rho_{\alpha} = M_{\alpha} \, \bar{c}_{\alpha} \quad \left| \cdot \frac{1}{\bar{c}} \quad \rightarrow \quad \frac{\rho_{\alpha}}{\bar{c}} = M_{\alpha} \underbrace{\frac{\bar{c}_{\alpha}}{\bar{c}}}_{X_{\alpha}} \quad \left| \sum_{\alpha} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\bar{c}} \underbrace{\sum_{\alpha} \rho_{\alpha}}_{\rho} = \underbrace{\sum_{\alpha} M_{\alpha} \, X_{\alpha}}_{=: \bar{M}} \right|$$

 $X_{\alpha}$  ... Molkonzentration oder Molenbruch,

 $\overline{M}$  ... mittlere Molmasse der Mischung

$$\rightarrow \quad \bar{c} = \frac{\rho}{\bar{M}}$$
$$\frac{\rho_{\alpha}}{\rho} = c_{\alpha}(\vec{r}, t) = \frac{M_{\alpha}}{\bar{M}(\vec{r}, t)} X_{\alpha}(\vec{r}, t)$$

(b)

Daltonsches Gesetz für ideale Gase:  $p = \sum_{\alpha} p_{\alpha}$ 

p ... Gesamtdruck der Mischung,  $p_{\alpha}$  ... Partialdruck der Komponente  $\alpha$ , thermische Zustandsgleichung für ideale Gase:

$$p_{\alpha} = \rho_{\alpha} \mathcal{R}_{\alpha} T = \rho_{\alpha} \frac{\mathcal{R}}{M_{\alpha}} T = \bar{c}_{\alpha} \mathcal{R} T \quad \Big| \sum_{\alpha}$$

 $\mathcal{R}_{\alpha} = \mathcal{R}/M_{\alpha}$ ... spezifische Gaskonstante,

 $\mathcal{R}$  ... universelle Gaskonstante,  $\mathcal{R} = 8.314\,462\,1\,\mathrm{J/(mol\,K)}, \quad \mathcal{R} = \mathcal{A}\,k_B$ 

 $k_B$ ... Boltzmann-Konstante,  $\ k_B = 1.380\,648\,8\cdot 10^{-23} \mathrm{J/K}$ 

$$\rightarrow \quad p = \bar{c} \,\mathcal{R} \,T = \rho \,\frac{\mathcal{R}}{\bar{M}} \,T$$
$$X_{\alpha} = \frac{\bar{c}_{\alpha}}{\bar{c}} = \frac{p_{\alpha}}{p}$$

(c)

Konvektions-Diffusionsgleichung für Binärmischung in Massenkonzentrationsdarstellung, (2):

$$\rho \frac{\mathrm{D}c_1}{\mathrm{D}t} = \rho \frac{\partial c_1}{\partial t} + \rho \left( \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right) c_1 = -\vec{\nabla} \vec{j}_1 + \sigma_1 \,.$$

Mit

$$\rho = \rho_1 + \rho_2, \quad c_1 + c_2 = 1, \quad \vec{v} = c_1 \vec{v}_1 + c_2 \vec{v}_2, \quad \vec{j}_1 = \rho_1 (\vec{v}_1 - \vec{v}),$$
  
$$\bar{c} = \bar{c}_1 + \bar{c}_2, \quad X_1 + X_2 = 1, \quad \vec{v}^* = X_1 \vec{v}_1 + X_2 \vec{v}_2, \quad \vec{j}_1^* = \bar{c}_1 (\vec{v}_1 - \vec{v}^*),$$
  
$$\bar{M} = M_1 X_1 + M_2 X_2$$

wird das totale Differential

$$dc_{1} = \underbrace{\frac{\partial c_{1}}{\partial X_{1}}}_{\underline{M_{1}}\bar{M} - M_{1}^{2}X_{1}} dX_{1} + \underbrace{\frac{\partial c_{1}}{\partial X_{2}}}_{\underline{M_{2}}}_{\underline{M_{2}}} \underbrace{\frac{\partial X_{2}}{\partial X_{2}}}_{-dX_{1}} \underbrace{\frac{\partial X_{2}}{\bar{M}^{2}}}_{-dX_{1}} dX_{1},$$

d.h.

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{M_1 M_2}{\bar{M}^2} \frac{\partial X_1}{\partial t}, \quad \vec{\nabla} c_1 = \frac{M_1 M_2}{\bar{M}^2} \vec{\nabla} X_1.$$

Aus

$$\vec{v} - \vec{v}_1 = (c_1 - 1)\vec{v}_1 + c_2\vec{v}_2 = c_2(\vec{v}_2 - \vec{v}_1), \\ \vec{v}^* - \vec{v}_1 = (X_1 - 1)\vec{v}_1 + X_2\vec{v}_2 = X_2(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \end{cases}$$
 (i)

folgt

$$\vec{j}_1 = \rho_1 c_2 \left( \vec{v}_1 - \vec{v}_2 \right) = \rho_1 c_2 \frac{\vec{v}_1 - \vec{v}^*}{X_2} = \frac{\rho_1 c_2}{\bar{c}_1 X_2} \vec{j}_1^* \,,$$

weiters mit  $c_2=M_2X_2/\bar{M}$  und  $\rho_1=\bar{c}_1M_1$  end gültig

$$\vec{j}_1 = \frac{M_1 M_2}{\bar{M}} \vec{j}_1^*$$

Mit der Differenz von (i),

$$\vec{v} - \vec{v}^* = \underbrace{(\vec{v}_2 - \vec{v}_1)}_{-\frac{\vec{j}_1^*}{\bar{c}_1 X_2}} (c_2 - X_2) = \underbrace{\frac{X_2 - c_2}{\bar{c}_1 X_2}}_{\frac{\bar{c}_1 X_2}{\bar{c} \bar{M}}} \vec{j}_1^*$$

und  $\bar{c} = \rho/\bar{M}$  wird

$$\rho \vec{v} = \rho \vec{v}^* + (M_1 - M_2) \, \vec{j}_1^*$$

Weiters ist

$$\vec{\nabla}\vec{j}_{1} = \vec{\nabla}\left(\frac{M_{1}M_{2}}{\bar{M}}\vec{j}_{1}^{*}\right) = M_{1}M_{2}\vec{j}_{1}^{*}\underbrace{\vec{\nabla}\left(\frac{1}{\bar{M}}\right)}_{-\frac{M_{1}-M_{2}}{\bar{M}^{2}}\vec{\nabla}X_{1}} + \frac{M_{1}M_{2}}{\bar{M}}\vec{\nabla}\vec{j}_{1}^{*}$$

und daher

$$\vec{\nabla}\vec{j}_1 = -\frac{M_1 M_2 (M_1 - M_2)}{\bar{M}^2} \vec{j}_1^* \vec{\nabla} X_1 + \frac{M_1 M_2}{\bar{M}} \vec{\nabla}\vec{j}_1^* \,.$$

In Konvektions-Diffusionsgleichung eingesetzt ergibt sich zunächst

$$\rho \frac{M_1 M_2}{\bar{M}^2} \frac{\partial X_1}{\partial t} + \left(\rho \vec{v}^* + (M_1 - M_2) \vec{j}_1^*\right) \frac{M_1 M_2}{\bar{M}^2} \vec{\nabla} X_1 = \frac{M_1 M_2 (M_1 - M_2)}{\bar{M}^2} \vec{j}_1^* \vec{\nabla} X_1 - \frac{M_1 M_2}{\bar{M}} \vec{\nabla} \vec{j}_1^* + \sigma_1 \,,$$

nach Multiplikation mit  $\bar{c}\bar{M}^2/(\rho M_1M_2)$  endgültig die entsprechende Gleichung für die Molkonzentration eines Binärgemisches

$$\bar{c}\frac{\mathrm{D}X_1}{\mathrm{D}t} = \bar{c}\frac{\partial X_1}{\partial t} + \bar{c}\left(\vec{v}^*\cdot\vec{\nabla}\right)X_1 = -\vec{\nabla}\vec{j}_1^* + \sigma_1^*, \quad \sigma_1^* := \frac{\bar{M}}{M_1M_2}\sigma_1$$

(d)

Unter Berücksichtigung von  $\sum_{\alpha} \vec{j}_{\alpha} = \vec{0}$ gilt für Binärmischungen

$$\vec{j}_1 = -\rho D_{12} \, \vec{\nabla} c_1 = -\vec{j}_2 = \rho D_{21} \underbrace{\vec{\nabla} c_2}_{-\vec{\nabla} c_1},$$

d.h.

$$D_{12} = D_{21} \equiv D$$

2.

Aus (2) folgt mit  $\partial c/\partial t = 0$ ,  $\vec{v} = \vec{0}$ ,  $\vec{\nabla} \rightarrow (d/dx) \vec{e_x}$ ,  $\sigma = 0$ 

$$\frac{\mathrm{d}^2 c}{\mathrm{d}x^2} = 0 \quad \to \quad c(x) = k_1 x + k_2$$

Die Randbedingungen liefern

$$k_1 = \frac{c_\delta - c_0}{\delta} \,, \quad k_2 = c_0 \,,$$

als Lösung somit das lineare Konzentrationsprofil

$$c(x) = (c_{\delta} - c_0)\frac{x}{\delta} + c_0.$$

Diffusionsstromdichte (hier gleich Massenstromdichte!):

$$\vec{j} = -\rho D \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}x} \vec{e}_x = \rho_1 (v_1 \vec{e}_x - \underbrace{\vec{v}}_{\vec{0}}) = -\rho D \frac{c_\delta - c_0}{\delta} \vec{e}_x = \rho_1 v_1 \vec{e}_x = const.$$

In Analogie zum Ohmschen Gesetz R = U/I definiert man den *Diffusionswiderstand*  $R_D$  zu

$$R_D = \left| \frac{\Delta \rho_1}{\rho_1 v_1} \right| = \frac{\rho \left( c_{\delta} - c_0 \right) \delta}{\rho D \left( c_{\delta} - c_0 \right)} = \frac{\delta}{D}.$$

3.

Für  $r_1 \leqslant r \leqslant r_2$  ergibt sich die Konzentrationsverteilung

(a) Hohlzylinder: 
$$c_A(r) = \frac{c_{A1} \ln(r/r_2) + c_{A2} \ln(r_1/r)}{\ln(r_1/r_2)}$$

(b) Hohlkugel: 
$$c_A(r) = \frac{r_1 c_{A1}(r_2 - r) + r_2 c_{A2}(r - r_1)}{r(r_2 - r_1)}$$

Aus der partiellen Massenbilanz für das raumfeste Kontrollvolumen V = const

$$\int_{V} \frac{\partial \rho_{\alpha}}{\partial t} \, \mathrm{d}V = -\oint_{O} \rho_{\alpha} \vec{v}_{\alpha} \vec{n} \, \mathrm{d}O + \int_{V} \sigma_{\alpha} \, \mathrm{d}V$$

folgt mit  $\rho_\alpha \vec{v}_\alpha = \vec{j}_\alpha + \rho_\alpha \vec{v}, \, \vec{v} = 0$  und  $\sigma_\alpha = 0$  für ein Binärgemisch

$$\int_{V} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} \, \mathrm{d}V = - \oint_{O} \vec{j}_A \vec{n} \, \mathrm{d}O \,.$$

Unter der Annahme quasistationärer Diffusion ergibt sich mit  $\vec{j}_A = j_{Ar} \vec{e}_r$ ,  $\vec{n} = \vec{e}_r$  zunächst

$$\frac{\mathrm{d}\rho_A}{\mathrm{d}t} \underbrace{\int_V}_{4\pi R^3/3} \mathrm{d}V = -j_{Ar}(R) \underbrace{\oint_O}_{4\pi R^2} \mathrm{d}O \,.$$

Unter Verwendung des Ergebnisses von Aufgabe 2 oder 3(b) gilt für die dünne Behälterwand  $\delta \ll R$ 

$$j_{Ar} = -\rho D \frac{\partial c_a}{\partial r} = -D \frac{\partial \rho_A}{\partial r} \approx -D \frac{\rho_A(R+\delta) - \rho_A(R)}{\delta}$$

Mit der thermischen Zustandsgleichung für ein ideales Gas und den Randbedingungen

$$\rho_A = p_A \frac{M_A}{\mathcal{R}T}, \quad \bar{c}_A(R) = \frac{\rho_A(R)}{M_A} = S \, p_A, \quad \rho_A(R+\delta) = 0$$

erhält man

$$\frac{\mathrm{d}p_A}{\mathrm{d}t} = -\frac{3\mathcal{R}TDS}{R\delta} p_A \quad \Big| \int_{0}^{t} \dots \mathrm{d}t \,, \int_{p_{A0}}^{p_A} \dots \mathrm{d}p_A$$

bzw. nach Variablentrennung und Integration

$$p_A(t) = p_{A0} \exp(-t/\tau)$$
,  $\tau = \frac{R\delta}{3\mathcal{R}TDS}$ 

mit der charakteristischen Zeitkonstanten  $\tau$  (vgl. Entladevorgang).

4.

5.

Aus der partiellen Massenbilanz (2) folgt für eindimensionale, stationäre Diffusion ( $\partial c_a/\partial t = 0$ ,  $\vec{v} = 0$ ,  $\vec{\nabla} = d/dy \vec{e_y}$ ) mit chemischer Reaktion erster Ordnung  $\sigma_A = -k_1 c_A (k_1 = const)$  für die Konzentration  $c_A(y)$ :

$$\frac{\mathrm{d}^2 c_A}{\mathrm{d}y^2} = \underbrace{\frac{k_1}{\rho D}}_{m^2} c_A \quad \to \quad c_A(y) = \alpha \, e^{-my} + \beta \, e^{my} \,, \quad \alpha, \beta \dots const$$

Aus den Randbedingungen (undurchlässige Wand beiy=s)

$$c_A(0) = c_{A0}, \quad \frac{\mathrm{d}c_A}{\mathrm{d}y}\Big|_{y=s} = 0$$

wird

$$\alpha = c_{A0} \frac{e^{ms}}{e^{-ms} + e^{ms}}, \quad \beta = c_{A0} \frac{e^{-ms}}{e^{-ms} + e^{ms}},$$

d.h.

$$c_A(y) = \frac{c_{A0}}{e^{2ms} + 1} \left[ e^{m(2s-y)} + e^{my} \right] .$$

Für die Diffussionsstromdichte folgt daraus

$$\vec{j}_A = -\rho D \frac{\mathrm{d}c_a}{\mathrm{d}y} \, \vec{e}_y = \rho D \, \frac{c_{A0} \, m}{e^{2ms} + 1} \left[ e^{m(2s-y)} - e^{my} \right] \, \vec{e}_y \, .$$

7.

Ausgehend von der partiellen Massenbilanz (2) unter der Annahme eindimensionaler, instationärer binärer Diffusion ohne Konvektion ( $\vec{v} = \vec{0}$ ) folgt für konstante Stoffwerte die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D \, \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} \, .$$

Mit dem Separations- bzw. Produktansatz

$$c_A(x,t) = X(x) T(t)$$

ergibt sich daraus nach Variablentrennung das Eigenwertproblem

$$\frac{1}{T}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \frac{D}{X}\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}x^2} = -\lambda^2 D\,,$$

wobei  $\lambda$  den Separationsparameter oder Eigenwert bezeichnet und das negative Vorzeichen gewählt wurde, um beschränkte Lösungen für  $t \to \infty$  zu gewährleisten. Lösen der beiden gewöhnlichen Differentialgleichungen führt auf

$$c_A(x,t) = (A \sin \lambda x + B \cos \lambda x) e^{-\lambda^2 D t}.$$

Aus den beiden Randbedingungen

$$c_A(0,t) = c_A(L,t) = 0$$

erhält man

$$B = 0$$
,  $\sin \lambda L = 0 \rightarrow \lambda = \lambda_m = \frac{m\pi}{L}$ ,  $m = 0, 1, 2, \cdots$ ,

d.h. unendlich viele, diskrete Eigenwerte  $\lambda_m$ . Wegen der Linearität der Diffusionsgleichung wird das *Superpositionsprinzip* zur Bestimmung der Gesamtlösung herangezogen (Darstellung der Lösung als Fourier-Reihe):

$$c_A(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \sin \frac{m\pi x}{L} e^{-\frac{m^2 \pi^2 D}{L^2} t}.$$

Dabei werden die Entwicklungskoeffizienten  $A_m$  über die Anfangsbedingung

$$c_A(x,0) = c_{A0} = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \sin \frac{m\pi x}{L} \quad \left| \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \, \mathrm{d}x \right|$$

durch Verwendung der *Orthogonalitätsrelationen* der trigonometrischen Ortseigenfunktionen  $(\delta_{nm}$  bezeichnet das Kronecker-Symbol)

$$c_{A0} \underbrace{\int_{0}^{L} \sin \frac{n\pi x}{L} dx}_{l} = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \underbrace{\int_{0}^{L} \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi x}{L} dx}_{l} = \frac{L}{2} A_n, \quad \delta_{nm} = \begin{cases} 1, n = m \\ 0, n \neq m \end{cases}$$

bestimmt:

$$A_n = \frac{2}{n\pi} \left[ 1 - (-1)^n \right] c_{A0} = \begin{cases} \frac{4 c_{A0}}{n\pi}, & n = 1, 3, 5, \cdots \\ 0, & n = 2, 4, 6, \cdots \end{cases}$$

Die an die Rand- und Anfangsbedingungen angepasste Gesamtlösung lautet daher

$$c_A(x,t) = \frac{4 c_{A0}}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)} \sin \frac{(2n+1)\pi x}{L} e^{-\frac{(2n+1)^2 \pi^2 D}{L^2}t}, \quad 0 \le x \le L.$$

8(a).

Die allgemeine Lösung von

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D \, \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2}$$

ist (s. Bsp. 7)

$$c_A(x,t) = (A \sin \lambda x + B \cos \lambda x) e^{-\lambda^2 D t} + \alpha + \beta x.$$

Unter Berücksichtigung der Randbedingungen

$$j_A(0,t) = j_A(L,t) = 0$$

ist mit

$$\frac{\partial c_A}{\partial x} = \lambda (A \cos \lambda x - B \sin \lambda x) e^{-\lambda^2 D t} + \beta$$
$$\frac{\partial c_A}{\partial x}\Big|_{x=0} = \lambda A e^{-\lambda^2 D t} + \beta = 0 \quad \to \quad A = 0, \quad \beta = 0,$$

 $\frac{\partial c_A}{\partial x}\Big|_{x=L} = -\lambda B \sin \lambda L \, e^{-\lambda^2 Dt} = 0 \quad \to \quad \sin \lambda L = 0 \quad \to \quad \lambda = \lambda_m = \frac{m\pi}{L} \,, \quad m = 0, 1, 2, \cdots$  $c_A(x, t) = \sum_{m=0}^{\infty} B_m \, \cos \frac{m\pi x}{L} \, e^{-\frac{m^2 \pi^2 D}{L^2} t} + \alpha \,.$ 

Aus der Anfangsbedingung

$$c_A(x,0) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 \,, & 0 \le x \le a \\ 0 \,, & \text{sonst} \end{array} \right\} = \sum_{m=0}^{\infty} B_m \, \cos \frac{m\pi x}{L} + \alpha$$

wird unter Verwendung der Orthogonalität der Winkelfunktionen

$$\underbrace{\int_{0}^{L} c_{A}(x,0) \cos \frac{n\pi x}{L} dx}_{L} = \sum_{m=0}^{\infty} B_{m} \underbrace{\int_{0}^{L} \cos \frac{m\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx}_{L} + \alpha \underbrace{\int_{0}^{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx}_{L} + \alpha \underbrace{\int_{0}^{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx}_{L} dx}_{\frac{L}{n\pi} \sin n\pi}$$

$$B_{n} = \frac{2}{\pi} \left(\frac{1}{n} \sin \frac{n\pi a}{L} - \frac{\alpha}{n} \sin n\pi\right), \quad B_{0} = 2\left(\frac{a}{L} - \alpha\right)$$

und daher

$$c_A(x,t) = B_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi a}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} e^{-\frac{n^2 \pi^2 D}{L^2}t} + \alpha.$$

Bestimmung von  $\alpha$  (Normierung):

(*i*)

$$c_A(0,0) = 1 = B_0 + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi a}{L}}_{1 - \frac{a}{L}} + \alpha \quad \rightarrow \quad \alpha = \frac{a}{L} \quad (\rightarrow B_0 = 0)$$

(ii) aus der integralen Massenbilanz:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{V} \rho_{A} \,\mathrm{d}V = -\underbrace{\oint_{O} \rho_{A} \vec{v}_{A} \vec{n} \,\mathrm{d}O}_{0} + \underbrace{\int_{V} \sigma_{A} \,\mathrm{d}V}_{0} = 0 \quad \rightarrow \quad \rho \int_{0}^{L} c_{A} \,\mathrm{d}x = const$$

d.h.

$$1 \cdot a = c_A|_{t \to \infty} L \quad \to \quad c_A|_{t \to \infty} = \frac{a}{L} = \alpha ,$$

damit endgültig

$$c_A(x,t) = \frac{a}{L} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin \frac{n\pi a}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} e^{-\frac{n^2 \pi^2 D}{L^2} t}.$$

(b)

Für Gemische idealer Gase gilt

$$p_{\alpha}(\rho_{\alpha}, T) = \rho_{\alpha} \frac{\mathcal{R}}{M_{\alpha}} T = \rho_{\alpha} \mathcal{R}_{\alpha} T ,$$
$$p = \rho \frac{\mathcal{R}}{\overline{M}} T = \sum_{\alpha} p_{\alpha} = T \sum_{\alpha} \rho_{\alpha} \mathcal{R}_{\alpha} = \rho T \underbrace{\sum_{\alpha} c_{\alpha} \mathcal{R}_{\alpha}}_{\mathcal{R}} ,$$
$$\underbrace{\frac{\mathcal{R}}{\overline{M}} = \mathcal{R}_{Mischung}}$$

und daher für das chemische Potential

$$\mu_{\alpha} = c_{v\alpha}T + u_{\alpha 0} - T(c_{v\alpha}\ln T - \mathcal{R}_{\alpha}\ln\rho - \mathcal{R}_{\alpha}\ln c_{\alpha} + s_{\alpha 0}) + \mathcal{R}_{\alpha}T.$$

Die Entropieproduktionsdichte (8) reduziert sich auf

$$\rho \dot{\sigma}_s = -\sum_{\alpha} j_{\alpha i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{\alpha}}{T}\right)$$

bzw.

$$\rho \dot{\sigma}_s = -\left[j_A \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_A}{T}\right) + j_B \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_B}{T}\right)\right] = -\frac{j_A}{T} \frac{\partial(\mu_A - \mu_B)}{\partial x}.$$

Mit

$$\frac{\partial(\mu_A - \mu_B)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( T\mathcal{R}_A \ln c_A - T\mathcal{R}_B \ln c_B \right) = T \left( \mathcal{R}_A \frac{1}{c_A} \frac{\partial c_A}{\partial x} + \mathcal{R}_B \frac{1}{1 - c_A} \frac{\partial c_A}{\partial x} \right)$$

und

$$j_A = -\rho D \, \frac{\partial c_A}{\partial x}$$

wird

$$\rho \dot{\sigma}_s = \rho D \left( \frac{\partial c_A}{\partial x} \right)^2 \left( \frac{\mathcal{R}_A}{c_A} + \frac{\mathcal{R}_B}{1 - c_A} \right) \ge 0.$$

Berechnung der (Misch-)Entropie aus der integralen Bilanz für ein raumfestes Kontrollvolumen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^L \rho s \,\mathrm{d}x = -\underbrace{\oint_O \theta_i n_i \,\mathrm{d}O}_0 + \int_0^L \rho \dot{\sigma}_s \,\mathrm{d}x$$

(*i*) über die Entropieproduktionsdichte:

$$S(t) - S(0) = \int_0^t \left( \int_0^L \rho \dot{\sigma}_s \, \mathrm{d}x \right) \, \mathrm{d}t$$

(*ii*) direkt:

$$S(t) = \int_0^L \rho s \, \mathrm{d}x = \int_0^L (\rho_A s_A + \rho_B s_B) \, \mathrm{d}x = \rho \int_0^L (c_A s_A + (1 - c_A) s_B) \, \mathrm{d}x$$

Mit

$$s_{\alpha} = c_{v\alpha} \ln T - \mathcal{R}_{\alpha} \ln \rho - \mathcal{R}_{\alpha} \ln c_{\alpha} + s_{\alpha 0}$$

wird

$$S(t) = \rho \int_0^L \left[ c_A(c_{vA} \ln T - \mathcal{R}_A \ln \rho + s_{A0}) - c_A \mathcal{R}_A \ln c_A + (1 - c_A)(c_{vB} \ln T - \mathcal{R}_B \ln \rho + s_{B0}) - (1 - c_A) \mathcal{R}_B \ln(1 - c_A) \right] dx.$$

Die Mischentropie  $\Delta S$  folgt unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung, des stationären Endzustandes

$$t \to \infty$$
:  $\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} \to 0$ ,  $\rho \dot{\sigma}_s \to 0$ ,  $c_A \to \frac{a}{L}$ 

und

$$S(0) = \rho \left[ (c_{vA} \ln T - \mathcal{R}_A \ln \rho + s_{A0}) a + (c_{vB} \ln T - \mathcal{R}_B \ln \rho + s_{B0})(L-a) \right],$$
  

$$S(t \to \infty) = \rho \left[ (c_{vA} \ln T - \mathcal{R}_A \ln(\frac{a}{L}) - \mathcal{R}_A \ln \rho + s_{A0}) a + (c_{vB} \ln T - \mathcal{R}_B \ln(1 - \frac{a}{L}) - \mathcal{R}_B \ln \rho + s_{B0})(L-a) \right]$$

zu

$$\Delta S = S(t \to \infty) - S(0) = -\rho \mathcal{R}_A a \ln(\frac{a}{L}) - \rho \mathcal{R}_B(L-a) \ln(1-\frac{a}{L}) \ge 0.$$

Speziell ist für a = L/2 unter Verwendung von  $\mathcal{R}/\bar{M} = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \mathcal{R}_{\alpha} = \mathcal{R}_{Mischung}$ 

$$\Delta S = \rho \frac{L}{2} \ln 2 \left( \mathcal{R}_A + \mathcal{R}_B \right) = \rho L \ln 2 \mathcal{R}_{Mischung}.$$

$$c_A(x,t) = c_{A0} + (c_{AL} - c_{A0})\frac{x}{L} + \frac{2}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{c_{AL}(-1)^m - c_{A0}}{m}\sin\frac{m\pi x}{L}e^{-\frac{m^2\pi^2 D}{L^2}t} + \frac{2}{L}\sum_{m=1}^{\infty}\sin\frac{m\pi x}{L}e^{-\frac{m^2\pi^2 D}{L^2}t}\int_0^L f(x')\sin\frac{m\pi x'}{L}\,\mathrm{d}x', \quad 0 \le x \le L$$

10(a).

$$\rho_f(x,t) = \rho_0 - \frac{4\rho_0}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)} \sin \frac{(2n+1)\pi x}{2L} e^{-\frac{(2n+1)^2 \pi^2 D}{4L^2}t}$$

(b)

$$m_s = \rho_0 L$$
,  $\Delta L = \frac{\rho_0}{\rho_s} L$ 

11.

$$c_A(x,t) = \frac{Sp_A}{L}x + \frac{2Sp_A}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m}\sin\frac{m\pi x}{L}e^{-\frac{m^2\pi^2 D}{L^2}t},$$
$$L = \frac{Sp_A\rho D}{j_{\infty}}$$

12.

$$c(x,t) = c_1 + (c_2 - c_1)\frac{x}{L} + \frac{2}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{c_2(-1)^m - c_1 + c_0[1 - (-1)^m]}{m}\sin\frac{m\pi x}{L}e^{-\frac{m^2\pi^2 D}{L^2}t}$$

9.

13.

Gesucht ist die Lösung von

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D \, \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2}$$

in einem unendlich ausgedehnten Medium. Dazu bietet sich neben der Methode der Greenschen Funktionen (siehe einschlägige Literatur) ein Ähnlichkeitsansatz

$$\rho_A(x,t) = t^a f(\eta), \quad \eta = \frac{x}{t^b}, \quad a,b = const$$

an. Mit

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = a t^{a-1} f - b t^{a-1} \eta f', \quad \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2} = t^{a-2b} f''$$

erhält man

$$t^{a-1} \left( a f - b \eta f' \right) - D t^{a-2b} f'' = 0 \,,$$

d.h. die Forderungen a beliebig und b = 1/2. Die gewöhnliche Differentialgleichung für f lautet

$$a f - \frac{\eta}{2} f' - D f'' = 0$$

mit der Lösung (z.B. Mathematica):

$$f(\eta) = \left[c_1 H_{-1-2a}\left(\frac{\eta}{2\sqrt{D}}\right) + c_2 F_1\left(\frac{1}{2} + a; \frac{1}{2}; \frac{\eta^2}{4D}\right)\right] e^{-\frac{\eta^2}{4D}}, \quad c_1, c_2 = const.$$

 $(H_n(z)...$  Hermite-Polynome,  ${}_1F_1(a; b; z)...$  Kummersche konfluente hypergeometrische Funktion) Falls a = -1/2 (Forderung nach Beschränktheit der Lösung für  $|\eta| \to \infty$ ), folgt mit  $H_0(z) = 1$ ,  ${}_1F_1(0; b; z) = 1$ ,  $c_1 + c_2 = C$  und der Beachtung der Translationsinvarianz  $x \to x - x'$  die Fundamentallösung der Diffusions- (bzw. Wärmeleitungs-) Gleichung

$$\rho_A(x,t) = \frac{C}{\sqrt{t}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}$$

(a)

Nach der integralen Massenbilanz (s. Bsp. 8(a)) gilt

$$m_A = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_A(x, t) \, \mathrm{d}x = const = \frac{C}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} \, \mathrm{d}x \, .$$

Mit der Substitution  $\xi = (x - x')/\sqrt{4Dt}$ ,  $dx = 2\sqrt{Dt} d\xi$  folgt daraus

$$m_A = 2C\sqrt{D}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}_{\sqrt{\pi}} = 2C\sqrt{\pi D} \quad \rightarrow \quad C = \frac{m_A}{2\sqrt{\pi D}},$$

d.h.

$$\rho_A(x,t) = \frac{m_A}{2\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}.$$

(b)

Aus einer beliebigen Anfangsverteilung  $\rho_A(x, 0) = \rho_{A0}(x)$  lässt sich aus der Fundamentallösung über  $dm_A = \rho_{A0}(x') dx'$  durch Superposition (entspricht hier Integration) die Partialdichteverteilung zu jedem beliebigen späteren Zeitpunkt t > 0 gewinnen:

$$\rho_A(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{A0}(x') \, e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} \, \mathrm{d}x' \, .$$

(c)

Für die gegebene stufenförmige Anfangsverteilung  $\rho_A(x,0) = \rho_{A0} = const$  für  $x \leq 0$  wird daraus

$$\rho_A(x,t) = \frac{\rho_{A0}}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{-\infty}^0 e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}} \,\mathrm{d}x'\,,$$

nach Substitution  $\eta = (x - x')/\sqrt{4Dt}$ ,  $dx' = -\sqrt{4Dt} d\eta$  weiters

$$\rho_A(x,t) = \frac{\rho_{A0}}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}}^{\infty} e^{-\eta^2} \,\mathrm{d}\eta = \frac{\rho_{A0}}{\sqrt{\pi}} \left[ \underbrace{\int_0^{\infty} e^{-\eta^2} \,\mathrm{d}\eta}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} - \underbrace{\int_0^{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}} e^{-\eta^2} \,\mathrm{d}\eta}_{\frac{\sqrt{\pi}}{2}} \right]$$

unter Verwendung der *Fehlerfunktion* erf(x) bzw. *komplementären Fehlerfunktion* erfc(x):

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\eta^2} d\eta$$
,  $\operatorname{erfc}(x) := 1 - \operatorname{erf}(x)$ ,  $\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x)$ .

Endgültig ist

$$\rho_A(x,t) = \frac{\rho_{A0}}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right),$$

wonach  $\rho_A(0,t) = \rho_A(x,t \to \infty) = \rho_{A0}/2.$ 



15.

Zur Lösung der Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D \, \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2}$$

im Halbraum  $x \ge 0$  wenden wir die *Laplace-Transformation* 

$$\tilde{\rho}_A(x,p) := \int_0^\infty e^{-pt} \rho_A(x,t) \,\mathrm{d}t$$

an und erhalten unter Verwendung von partieller Integration und Berücksichtigung der Anfangsbedingung  $f^{\infty}$ 

$$\int_{0}^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial \rho_{A}}{\partial t} dt = \underbrace{\rho_{A} e^{-pt} \Big|_{0}^{\infty}}_{-\rho_{A1}} + p \underbrace{\int_{0}^{\infty} e^{-pt} \rho_{A} dt}_{\tilde{\rho}_{A}},$$
$$D \int_{0}^{\infty} e^{-pt} \frac{\partial^{2} \rho_{A}}{\partial x^{2}} dt = D \frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} \int_{0}^{\infty} e^{-pt} \rho_{A} dt = D \frac{\partial^{2} \tilde{\rho}_{A}}{\partial x^{2}},$$

die inhomogene Gleichung

$$D \, \frac{\partial^2 \tilde{\rho}_A}{\partial x^2} - p \tilde{\rho}_A = -\rho_{A1}$$

Aus dem Ansatz für die homogene Gleichung  $\tilde{\rho}_{Ah} = k e^{qx}$  folgt  $q = \pm \sqrt{p/D}$ , d.h.

$$\tilde{\rho}_{Ah} = k_1 \, e^{-\sqrt{p/D} \, x} + k_2 \, e^{\sqrt{p/D} \, x} \,,$$

wovon  $k_2 = 0$  wegen der Beschränktheit der Lösung für  $x \to \infty$  gesetzt werden muß. Für die inhomogene Gleichung setzt man  $\tilde{\rho}_A = k_1 e^{-\sqrt{p/D}x} + C$  und erhält  $C = \rho_{A1}/p$ . Aus der (transformierten!) Randbedingung folgt

$$\tilde{\rho}_A(0,p) = \frac{\rho_{A0}}{p} \quad \rightarrow \quad k_1 = \frac{\rho_{A0} - \rho_{A1}}{p}$$

und damit für die Lösung im Laplace-Raum

$$\tilde{\rho}_A(x,p) = (\rho_{A0} - \rho_{A1}) \frac{e^{-\sqrt{p/D}x}}{p} + \frac{\rho_{A1}}{p}$$

Laplace-Rücktransformation (s. Tabelle) führt auf die endgültige Lösung

$$\rho_A(x,t) = \rho_{A1} + (\rho_{A0} - \rho_{A1}) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)$$

Die Diffusionstromdichte an der Wand x = 0 ergibt sich aus dem Fickschen Gesetz zu (s. Bsp. 18)

$$\vec{j}_A = -D \left. \frac{\partial \rho_A}{\partial x} \right|_{x=0} \vec{e}_x = (\rho_{A0} - \rho_{A1}) \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \vec{e}_x \,.$$

16.

$$c_A(x,t) = \frac{c_{A0}}{2} \left[ e^{-\sqrt{k_1/(\rho D)}x} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} - \sqrt{\frac{k_1t}{\rho}}\right) + e^{\sqrt{k_1/(\rho D)}x} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} + \sqrt{\frac{k_1t}{\rho}}\right) \right]$$
17(a).

$$c_A(x,t) = \frac{j_{A0}}{2\sqrt{\rho Dk_1}} \left[ e^{-\sqrt{k_1/(\rho D)}x} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} - \sqrt{\frac{k_1t}{\rho}}\right) + e^{\sqrt{k_1/(\rho D)}x} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} + \sqrt{\frac{k_1t}{\rho}}\right) \right]$$
(b)

$$c_A(x,t) = \frac{j_{A0}}{\sqrt{\rho D k_1}} e^{-\sqrt{k_1/(\rho D)}x},$$
$$L = \ln 2\sqrt{\frac{\rho D}{k_1}}$$

18(a).

Nach Bsp. 15 ist

$$\rho_S(x,t) = \rho_{S0} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right).$$

(b)

Die Diffusionstromdichte an der Phasengrenze ist

$$\vec{j}_S(0,t) = -D\frac{\partial\rho_S}{\partial x}\Big|_{x=0}\vec{e}_x = -D\rho_{S0}\frac{\partial}{\partial x}\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)\Big|_{x=0}\vec{e}_x\,,$$

mit Hilfe der Ableitungs-Formel für die Fehlerfunktion (n = 0)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}e^{-z^2}$$

erhält man mit  $z = x/\sqrt{4Dt}$ 

$$\frac{\partial}{\partial x}\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) = \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z}\operatorname{erfc}(z) = -\frac{e^{-x^2/(4Dt)}}{\sqrt{\pi Dt}},$$

d.h.

$$\vec{j}_S(0,t) = \rho_{S0} \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \, \vec{e}_x \, .$$

Bestimmung der Schichtdickenabnahme über Massenstromdichte durch Phasengrenze:

$$\vec{j}_S(0,t) = \rho_{Ss} \, \vec{v}_s = \rho_{Ss} \, \frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} \, \vec{e}_x \,,$$
$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \frac{\rho_{S0}}{\rho_{Ss}} \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \quad \rightarrow \quad \Delta L(t) = \frac{\rho_{S0}}{\rho_{Ss}} \sqrt{\frac{D}{\pi}} \int_0^t \frac{\mathrm{d}t'}{\sqrt{t'}} = \frac{2\rho_{S0}}{\rho_{Ss}} \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \,.$$

Diffusion (Wärmeleitung) in kugelförmigen Geometrien: gesucht ist die Lösung von

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D \,\Delta \rho_A \,,$$

dabei gilt für den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten  $(r, \theta, \varphi)$ :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Unter der Voraussetzung von *Radialsymmetrie* (keine  $\theta$ ,  $\varphi$ -Abhängigkeit) ergibt sich

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D\left(\frac{2}{r}\frac{\partial \rho_A}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial r^2}\right) \,,$$

und nach Variablensubstitution

$$u(r,t) = r \rho_A(r,t)$$

schließlich

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \,,$$

d.h. die Gleichung für den ebenen ("eindimensionalen") Fall. Es können somit die dort gewonnenen Ergebnisse hier verwendet werden, dabei müssen die Anfangs- und Randbedingungen auf die Variable *u* entsprechend transformiert werden.

19(a).

$$\rho_A(r,t) = \rho_{A1} + \frac{R}{r} \left(\rho_{A0} - \rho_{A1}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{r-R}{\sqrt{4Dt}}\right), \quad r > R,$$

(b)

$$\vec{j}_A(R,t) = -D \left. \frac{\partial \rho_A}{\partial r} \right|_{r=R} \vec{e}_r = D \left( \rho_{A0} - \rho_{A1} \right) \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \right) \vec{e}_r ,$$
$$\Delta R(t) = \frac{D \left( \rho_{A0} - \rho_{A1} \right)}{\rho_{As}} \left( \frac{t}{R} + 2\sqrt{\frac{t}{\pi D}} \right)$$

20(a).

$$\rho_A(r,t) = \rho_{A0} + \frac{2R\rho_{A0}}{r\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin \frac{n\pi r}{R} e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{R^2}t} + \frac{2}{rR} \sum_{n=1}^{\infty} \sin \frac{n\pi r}{R} e^{-\frac{n^2\pi^2 D}{R^2}t} \int_0^R r' f(r') \sin \frac{n\pi r'}{R} \, \mathrm{d}r', \quad 0 \leqslant r \leqslant R$$

(b)

$$\rho_A(r,t) = \rho_{A0} + (\rho_{A0} - \rho_{A1}) \frac{2R}{r\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin \frac{n\pi r}{R} e^{-\frac{n^2 \pi^2 D}{R^2} t}$$

21.

Anfangs- und Randbedingungen sind durch

$$T(x,0) = T_0, \quad T(0,t>0) = T_1 < T_e, \quad T(x \to \infty,t) \to T_0$$

gegeben, bei inkompressibler Betrachtung gilt für die spezifischen Wärmekapazitäten für feste und fluide Phasen

$$c_p = c_v \equiv c$$
.

(a) *feste Phase* (Index *s*)

Die Leistungsbilanz (5) vereinfacht sich mit Hilfe des Fourierschen Gesetzes zu

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = a_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2}, \quad a_s = \frac{\lambda_s}{\rho_s c_s},$$

worin  $a_s$  die Temperaturleitfähigkeit oder Temperaturleitzahl bezeichnet. Unter Verwendung der dimensionslosen Temperatur

$$T^* = \frac{T - T_1}{T_0 - T_1}$$

und der Ähnlichkeitsvariablen (vergl. Bsp. 13)

$$\eta_s = \frac{x}{\sqrt{4a_s t}}$$

erhält man

$$\frac{\mathrm{d}^2 T_s^*}{\mathrm{d}\eta_s^2} + 2\eta_s \frac{\mathrm{d}T_s^*}{\mathrm{d}\eta_s} = 0 \quad \to \quad T_s^*(\eta_s) = c_1 \operatorname{erf}(\eta_s) + c_2$$

aus der Randbedingung  $T_s^*(\eta_s = 0) = 0$  weiters  $c_2 = 0$ . An der fest-flüssig Phasengrenze x = h gilt  $T = T_e$ , woraus

$$T_e^* = c_1 \operatorname{erf}\left(\frac{h}{\sqrt{4a_s t}}\right) = const.$$

und somit

$$\frac{h}{\sqrt{4a_st}} =: \gamma = const. > 0, \quad h(t) = \gamma \sqrt{4a_st}, \quad c_1 = \frac{T_e^*}{\mathrm{erf}\gamma}$$

mit einer noch zu bestimmenden Konstanten  $\gamma$  folgt. Für die *Phasenfrontgeschwindigkeit*  $\dot{h}$  erhält man

$$\dot{h} = \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = \gamma \sqrt{\frac{a_s}{t}} \,.$$

(b) *flüssige Phase* (Index f)

Zur Bestimmung der Geschwindigkeit  $u_f$  der flüssigen Phase verwendet man jene *dynamische Verträglichkeitsbedingung* an der Phasengrenzfläche (Dichtesprungstelle), welche aus der integralen Massenbilanz folgt (hier o.B.): die Stetigkeit der Massenstromdichte an der Sprungstelle liefert

$$\rho_s(\underbrace{u_s}_0 - \dot{h}) = \rho_f(u_f - \dot{h}) \quad \to \quad u_f = \frac{\rho_f - \rho_s}{\rho_f} \dot{h}$$

Aus der Leistungsbilanz (5) erhält man

$$\frac{\mathrm{D}T_f^*}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial T_f^*}{\partial t} + u_f \frac{\partial T_f^*}{\partial x} = a_f \frac{\partial^2 T_f^*}{\partial x^2}, \quad a_f = \frac{\lambda_f}{\rho_f c_f},$$

bzw. unter Verwendung von  $u_f$  und der Ähnlichkeitsvariablen  $\eta_f = x/\sqrt{4a_f t}$ 

$$\frac{\mathrm{d}^2 T_f^*}{\mathrm{d}\eta_f^2} + \left(2\eta_f - 2\gamma \,\frac{(\rho_f - \rho_s)}{\rho_f} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}}\right) \frac{\mathrm{d}T_f^*}{\mathrm{d}\eta_f} = 0$$
$$\rightarrow \quad T_f^*(\eta_f) = k_1 \,\mathrm{erf}\left(\eta_f - \gamma \,\frac{(\rho_f - \rho_s)}{\rho_f} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}}\right) + k_2$$

Aus der Fernfeldbedingung  $T_f^*(\eta_f \to \infty, t) \to 1$  ergibt sich daraus  $k_2 = 1 - k_1$ , d.h.

$$T_f^*(\eta_f) = 1 - k_1 \operatorname{erfc}\left(\eta_f - \gamma \,\frac{(\rho_f - \rho_s)}{\rho_f} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}}\right)$$

An der Phasengrenze x = h gilt wieder  $T = T_e$  oder

$$T_e^* = 1 - k_1 \operatorname{erfc}\left(\frac{h}{\sqrt{4a_f t}} - \gamma \,\frac{(\rho_f - \rho_s)}{\rho_f} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}}\right) \,,$$

woraus mit dem Ergebnis für h nach Vereinfachung

$$k_1 = (1 - T_e^*) \operatorname{erfc}^{-1} \left( \gamma \frac{\rho_s}{\rho_f} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}} \right)$$

folgt. Zur Bestimmung von  $\gamma$  verwendet man wieder eine dynamische Verträglichkeitsbedingung, welche aus der integralen Leistungsbilanz für die Phasensprungstelle ermittelt werden kann: es gilt (o.B.) für die Wärmeströme  $\vec{q} = q \ \vec{e}_x$  und die Erstarrungsenthalpie  $h_e$  an der Stelle x = h

$$q_f - q_s = \rho_s h h_e \,,$$

bzw. mit dem Fourierschen Gesetz

$$-\lambda_f \left. \frac{\partial T_f}{\partial x} \right|_{x=h} + \lambda_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial x} \right|_{x=h} = \rho_s \, \dot{h} \, h_e \, .$$

Setzt man die Ergebnisse für  $T_s$  und  $T_f$  ein, ergibt sich nach Vereinfachungen die transzendente Gleichung

$$\frac{e^{-\gamma^2}}{\operatorname{erf}\gamma} - \frac{(T_0 - T_e)}{(T_e - T_1)} \frac{\lambda_f}{\lambda_s} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}} \exp\left(-\gamma^2 \frac{a_s}{a_f} \frac{\rho_s^2}{\rho_f^2}\right) \operatorname{erfc}^{-1}\left(\gamma \sqrt{\frac{a_s}{a_f}} \frac{\rho_s}{\rho_f}\right) = \gamma \sqrt{\pi} Ph,$$

für  $\gamma$ , welche i.a. numerisch gelöst werden muß. Hierin bezeichnet Ph die Phasenübergangszahl

$$Ph := \frac{h_e}{c_s(T_e - T_1)} =: \frac{1}{Ste} \,,$$

welches das Verhältnis von spezifischer Erstarrungsenthalpie und der Differenz der spezifischen inneren Energien des Festkörpers bei Erstarrungstemperatur  $T_e$  und Wandtemperatur  $T_1$  ausdrückt. Der Kehrwert von *Ph* wird *Stefan-Zahl Ste* genannt.

#### (c) Frieren von Wasser

Mit den gegebenen Zahlenwerten erhält man  $a_s = 1.149 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $a_f = 1.440 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$  und Ph = 31.8, aus der Bestimmungsgleichung für  $\gamma$  (z.B. mit FindRoot in Mathematica) folgt

$$\gamma \approx 0.1159$$
.

Führt man in der Bestimmungsgleichung für  $\gamma$  die Abkürzungen

$$a := \frac{(T_0 - T_e)}{(T_e - T_1)} \frac{\lambda_f}{\lambda_s} \sqrt{\frac{a_s}{a_f}} \approx 0.767, \quad b := \sqrt{\frac{a_s}{a_f}} \frac{\rho_s}{\rho_f} \approx 2.60$$

ein, dann lässt sich für  $\gamma \ll 1$  die Näherung (positive Lösung der entwickelten Gleichung einschließlich Terme von  $O(\gamma^2)$ )

$$\gamma \sim \frac{3\sqrt{\pi}}{3a + \sqrt{9a(a+4b) + 6(1+3Ph)\pi}} \approx 0.1161$$

angeben. Für - wie im vorliegenden Fall - große Werte der Phasenübergangszahl  $Ph \gg 1$  läßt sich daraus durch Entwicklung weiters der einfache Zusammenhang

$$\gamma \sim \frac{1}{\sqrt{2Ph}} - \frac{a}{2\sqrt{\pi}Ph} + O(Ph^{-3/2}) \approx 0.1186 \quad (\gamma \ll 1, \ Ph \gg 1)$$

gewinnen.

(a) Unter Verwendung der Materialgesetze (Fouriersches und Ficksches Gesetz, Reibspannungstensor für Newtonsches Fluid)

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad j_i = -\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i}, \quad \sigma'_{ij} = \bar{\mu} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

gilt mit den getroffenen Voraussetzungen und Annahmen zunächst

• *stationäre* Verhältnisse:

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}}_{0} + v_i \frac{\partial}{\partial x_i},$$

• inkompressible Strömung, aus globaler Massenbilanz (3) folgt

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} = 0 \quad \to \quad \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \,, \quad \sigma'_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right),$$

• keine äußeren Kräfte (z.B. Schwerkraft) sowie keine chemischen Reaktionen:

$$g_i \equiv 0, \quad \sigma_\alpha = 0,$$

• binäres Gemisch idealer Gase (A... Wasser, B... Luft):

$$c_A = c$$
,  $c_B = 1 - c$ ,  $\vec{j}_A = \vec{j}$ ,  $\vec{j}_B = -\vec{j}$ ,  $\beta = \frac{1}{T}$ ,

• *ebene Strömungsverhältnisse*, da sich Feldgrößen hauptsächlich in Strömungsrichtung und wandnormaler Richtung, aber nicht quer dazu (Spannweitenrichtung) ändern:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad \vec{v} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \vec{j} = \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix}.$$

Damit ergeben sich die vereinfachten Grundgleichungen (in dimensionsbehafteter Darstellung) zu: partielle Massenbilanz (2)

$$\tilde{\rho}\tilde{u}\frac{\partial c}{\partial \tilde{x}} + \tilde{\rho}\tilde{v}\frac{\partial c}{\partial \tilde{y}} = \tilde{\rho}\frac{\partial}{\partial \tilde{x}}\left(\tilde{D}\frac{\partial c}{\partial \tilde{x}}\right) + \tilde{\rho}\frac{\partial}{\partial \tilde{y}}\left(\tilde{D}\frac{\partial c}{\partial \tilde{y}}\right),$$

globale Massenbilanz (3)

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{y}} = 0 \,,$$

Impulsbilanz (Navier-Stokes Gleichungen)

$$x: \quad \tilde{\rho}\tilde{u}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{x}} + \tilde{\rho}\tilde{v}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{y}} = -\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{x}} + \frac{\partial}{\partial\tilde{x}}\left(2\tilde{\mu}\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{x}}\right) + \frac{\partial}{\partial\tilde{y}}\left[\tilde{\mu}\left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{y}} + \frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{x}}\right)\right],$$
$$y: \quad \tilde{\rho}\tilde{u}\frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{x}} + \tilde{\rho}\tilde{v}\frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{y}} = -\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{y}} + \frac{\partial}{\partial\tilde{x}}\left[\tilde{\mu}\left(\frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{x}} + \frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{y}}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial\tilde{y}}\left(2\tilde{\mu}\frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{y}}\right),$$

22.

Leistungsbilanz (5)

$$\tilde{\rho}\tilde{c}_{p}\tilde{u}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial\tilde{x}} + \tilde{\rho}\tilde{c}_{p}\tilde{v}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial\tilde{y}} - \tilde{u}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{x}} - \tilde{v}\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{y}} = \tilde{\mu}\left[2\left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{x}}\right)^{2} + 2\left(\frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{y}}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial\tilde{y}} + \frac{\partial\tilde{v}}{\partial\tilde{x}}\right)^{2}\right] \\ + \frac{\partial}{\partial\tilde{x}}\left(\tilde{\lambda}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial\tilde{x}}\right) + \frac{\partial}{\partial\tilde{y}}\left(\tilde{\lambda}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial\tilde{y}}\right) - \left(\tilde{j}_{x}\frac{\partial}{\partial\tilde{x}} + \tilde{j}_{y}\frac{\partial}{\partial\tilde{y}}\right)(\tilde{h}_{A} - \tilde{h}_{B}).$$

In der Leistungsbilanz ist der Enthalpiediffusionsterm gegenüber dem Wärmeleitungsterm bei *inerten Gemischen* - wie im vorliegenden Fall - i.a. vernachlässigbar. Bei reagierenden Gemischen trifft dies nicht zu, die Enthalpiedifferenz  $(\tilde{h}_A - \tilde{h}_B)$  ist dann von der Größenordnung der Reaktionsenthalpie, welche beträchtliche Werte annehmen kann, [10].

Im Folgenden führen wir *dimensionslose Größen* mit Hilfe von für das Problem charakteristischen Bezugsgrößen ein (Index  $\infty$  ... Referenzgröße, Index w ... Wandgröße):

$$\begin{split} \theta &= \frac{\tilde{T} - \tilde{T}_{\infty}}{\tilde{T}_{\infty}}, \quad \vartheta = \frac{\tilde{T} - \tilde{T}_{\infty}}{\tilde{T}_{w} - \tilde{T}_{\infty}}, \\ \phi &= \frac{\tilde{\rho}_{A} - \tilde{\rho}_{A\infty}}{\tilde{\rho}_{B}} = c - c_{\infty}, \quad \varphi = \frac{c - c_{\infty}}{c_{w} - c_{\infty}}, \\ x &= \frac{\tilde{x}}{\tilde{L}}, \quad y = \frac{\tilde{y}}{\tilde{L}}\sqrt{Re}, \quad u = \frac{\tilde{u}}{\tilde{u}_{\infty}}, \quad v = \frac{\tilde{v}}{\tilde{u}_{\infty}}\sqrt{Re}, \\ p &= \frac{\tilde{p} - \tilde{p}_{\infty}}{\tilde{\rho}_{\infty}\tilde{u}_{\infty}^{2}}, \quad \rho = \frac{\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}_{\infty}} = 1, \quad \mu = \frac{\tilde{\mu}}{\tilde{\mu}_{\infty}}, \\ c_{p} &= \frac{\tilde{c}_{p}}{\tilde{c}_{p\infty}}, \quad D = \frac{\tilde{D}}{\tilde{D}_{\infty}}, \\ Re := \frac{\tilde{\rho}_{\infty}\tilde{u}_{\infty}\tilde{L}}{\tilde{\mu}_{\infty}} \gg 1, \quad Pr := \frac{\tilde{\mu}_{\infty}\tilde{c}_{p\infty}}{\tilde{\lambda}_{\infty}}, \quad Ec := \frac{\tilde{u}_{\infty}^{2}}{\tilde{c}_{p\infty}(\tilde{T}_{w} - \tilde{T}_{\infty})}, \quad Sc := \frac{\tilde{\mu}_{\infty}}{\tilde{\rho}_{\infty}\tilde{D}_{\infty}}. \end{split}$$

Da wir an der Beschreibung der Vorgänge im wandnahen Bereich der Strömung (der dünnen Grenzschicht) interessiert sind, haben wir die für laminare Strömung gültige *Grenzschichtskalierung* in der wandnormalen Koordinate y und Geschwindigkeit v berücksichtigt. Sie trägt dem Umstand Rechnung, dass für die Grenzschichtdicke  $\delta \propto \tilde{L}/\sqrt{Re}$  und die wandnormale Geschwindigkeitskomponente innerhalb der Grenzschicht  $\tilde{v} \propto \tilde{u}_{\infty}/\sqrt{Re}$  für  $Re \gg 1$  abgeschätzt werden kann. Unter Verwendung der *dimensionslosen Kennzahlen Reynolds-Zahl Re, Prandtl-Zahl Pr, Eckert-Zahl Ec* und *Schmidt-Zahl Sc* lauten die Grundgleichungen in dimensionsloser Form: globale Massenbilanz:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \,,$$

Impulsbilanz:

$$x: \quad u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[ 2\frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right),$$
$$y: \quad \frac{1}{Re} \left[ u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} \right] = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[ 2\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right],$$

Leistungsbilanz:

$$uc_{p}\frac{\partial\vartheta}{\partial x} + vc_{p}\frac{\partial\vartheta}{\partial y} - Ec\left(u\frac{\partial p}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = Ec\mu\left[\frac{2}{Re}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^{2} + \frac{2}{Re}\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^{2} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{Re}\frac{\partial v}{\partial x}\right)^{2}\right] + \frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial\vartheta}{\partial x}\right) + \frac{1}{Pr}\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial\vartheta}{\partial y}\right),$$

partielle Massenbilanz:

$$u\frac{\partial\varphi}{\partial x} + v\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{\operatorname{Re}\operatorname{Sc}}\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) + \frac{1}{\operatorname{Sc}}\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)$$

Die *Grenzschichtnäherung* (führender Ordnung) besteht nun darin, den Grenzübergang  $Re \to \infty$  zu vollziehen, es resultieren für die Beschreibung der Grenzschichtströmung, der Temperatur- und Konzentrationsgrenzschicht die *Prandtlschen Grenzschichtgleichungen*: globale Massenbilanz:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0\,,$$

Impulsbilanz:

$$\begin{aligned} x : & u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right), \\ y : & \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad \to \quad p = p(x) \end{aligned}$$

Leistungsbilanz:

$$uc_p \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + vc_p \frac{\partial \vartheta}{\partial y} = Ec \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + u \frac{\partial p}{\partial x} \right] + \frac{1}{Pr} \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial \vartheta}{\partial y} \right),$$

partielle Massenbilanz:

$$u\frac{\partial\varphi}{\partial x} + v\frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{1}{Sc}\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right).$$

Die für die Lösung nötigen Randbedingungen lauten an der Wand

$$y = 0$$
:  $u = 0$ ,  $v = v_w$ ,  $\vartheta = \varphi = 1$ 

und im Fernfeld (Grenzschichtrand)

$$y \to \infty$$
:  $u \to U_w(x)$ ,  $\vartheta \to 0$ ,  $\varphi \to 0$ .

Die Forderung u(x, 0) = 0 wird *Haftbedingung* genannt, die hier noch unbekannte Größe  $v_w(x)$  bestimmt den Stoffstrom durch die Oberfläche und  $u(x, y \to \infty) \to U_w(x)$  wird als *Anpassungsbedingung* an die reibungsfreie Außenströmung bezeichnet. Für die Lösung benötigt man weiters 'Anfangsbedingungen' für die Größen  $u, v, \vartheta, \varphi$  z.B. an der Stelle x = 0.

Wie man aus der Impulsbilanz für die *y*-Richtung sieht, ist der Druck über die Grenzschichtdicke konstant. Der Druckverlauf p(x) stimmt daher mit jenem der reibungsfreien Außenströmung an der Körperoberfläche überein und lässt sich aus der Bernoulli-Gleichung für die Wandstromlinie

bestimmen:

$$\tilde{p} + \tilde{\rho} \frac{\tilde{U}_w^2}{2} = const. \quad \rightarrow \quad p + \frac{U_w^2}{2} = const. \quad \left| \begin{array}{c} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \\ \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} + U_w \frac{\mathrm{d}U_w}{\mathrm{d}x} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x} = -U_w \frac{\mathrm{d}U_w}{\mathrm{d}x} \,.$$

Der Druckverlauf ist somit von der Außenströmung aufgeprägt, d.h. für die Grenzschichtrechnung als bereits bekannt vorausgesetzt. Die Grenzschichtgleichungen stellen somit ein gekoppeltes, nichtlineares partielles Gleichungssystem zweiter Ordnung für die Geschwindigkeits-, Temperaturund Konzentrationsverteilung (Unbekannte  $u, v, \vartheta, \varphi$  in Abhängigkeit von x, y) dar, welches i.a. numerisch gelöst werden muss.

Wie aus den Grenzschichtgleichungen leicht ersichtlich ist, muss bei der vorliegenden Problemstellung für eine *Analogie zwischen Wärme- und Stoffübertragung* gelten (Vergleich von Leistungsund partieller Massenbilanz):

$$Pr = Sc$$
,  $Ec = 0$ ,  $c_p = 1$ ,  $\lambda = D$ ,

d.h. die numerischen Werte von Prandtl- und Schmidt-Zahl müssen übereinstimmen, die Eckert-Zahl (Dissipation) muss hinreichend klein sein, die spezifische Wärmekapazität muss konstant sein, die (dimensionslosen!) Werte von  $\lambda$  und D sowie die Rand- und Anfangsbedingungen für  $\vartheta$ und  $\varphi$  müssen gleich sein.

(b)

Für die weitere Betrachtung wählen wir  $c_p = \lambda = \mu = D = 1$ , d.h. konstante Stoffwerte, sowie Ec = 0, und suchen nach Ähnlichkeitslösungen der Grenzschichtgleichungen, d.h. weiteren möglichen Vereinfachungen. Zu diesem Zweck wird zunächst die Stromfunktion  $\tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{y})$  mit der bekannten Eigenschaft

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{x}} = -\tilde{v} , \quad \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{y}} = \tilde{u}$$

eingeführt, entsprechend in dimensionsloser Form:

$$\psi = \frac{\sqrt{Re}}{\tilde{L}\tilde{u}_{\infty}}\tilde{\psi} \quad \to \quad \frac{\partial\psi}{\partial x} = -v \,, \quad \frac{\partial\psi}{\partial y} = u \,.$$

Damit werden die Grenzschichtgleichungen zu: globale Massenbilanz (sie wird durch Einführung von  $\psi$  identisch erfüllt):

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} = 0 \,,$$

Impulsbilanz:

$$x: \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3} - U_w \frac{\mathrm{d}U_w}{\mathrm{d}x} = 0 \,,$$

Leistungsbilanz:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \vartheta}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \vartheta}{\partial y} - \frac{1}{Pr} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} = 0,$$

partielle Massenbilanz:

$$\frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{1}{Sc}\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0$$

Der Ähnlichkeitsansatz lautet

$$\eta = \frac{y}{\delta(x)}, \quad f(\eta) = \frac{\psi(x,y)}{\delta(x)U_w(x)}, \quad \hat{\vartheta}(\eta) = \frac{\vartheta(x,y)}{\vartheta_N(x)}, \quad \hat{\varphi}(\eta) = \frac{\varphi(x,y)}{\varphi_N(x)}$$

mit der Ähnlichkeitsvariablen  $\eta$  und den zunächst beliebigen Skalierungsfunktionen  $\delta(x)$ ,  $\vartheta_N(x)$ und  $\varphi_N(x)$ , welche aus der Forderung bestimmt werden, dass die Stromfunktion f, die Temperaturverteilung  $\hat{\vartheta}$  und die Konzentrationsverteilung  $\hat{\varphi}$  nur mehr von der Ähnlichkeitsvariablen  $\eta$ abhängen sollen. Damit wird (' bedeutet Ableitung nach dem jeweiligen Argument)

$$\begin{split} u &= \frac{\partial \psi}{\partial y} = \delta U_w \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\eta} \underbrace{\frac{\partial \eta}{\partial y}}_{1/\delta} = U_w f', \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = -(\delta U_w)' f + U_w \delta' \eta f' \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} &= U'_w f' - U_w \frac{\delta'}{\delta} \eta f'', \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{U_w}{\delta} f'', \quad \frac{\partial^3 \psi}{\partial y^3} = \frac{U_w}{\delta^2} f''', \\ \frac{\partial \vartheta}{\partial x} &= -\vartheta_N \frac{\delta'}{\delta} \eta \, \hat{\vartheta}' + \vartheta'_N \hat{\vartheta}, \quad \frac{\partial \vartheta}{\partial y} = \frac{\vartheta_N}{\delta} \, \hat{\vartheta}', \quad \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} = \frac{\vartheta_N}{\delta^2} \, \hat{\vartheta}'', \end{split}$$

d.h.

Impulsbilanz (x):

$$f''' + f f''(U_w \,\delta\delta' + \delta^2 U'_w) + (1 - f'^2) \,\delta^2 U'_w = 0 \,,$$

Leistungsbilanz:

$$\hat{\vartheta}'' + (\delta U_w)' \delta \Pr f \,\hat{\vartheta}' - \frac{U_w \vartheta'_N \delta^2}{\vartheta_N} \Pr f' \hat{\vartheta} = 0 \,,$$

partielle Massenbilanz:

$$\hat{\varphi}'' + (\delta U_w)' \delta \operatorname{Sc} f \hat{\varphi}' - \frac{U_w \varphi'_N \delta^2}{\varphi_N} \operatorname{Sc} f' \hat{\varphi} = 0$$

Für Selbstähnlichkeit muss gelten

$$U_w \,\delta\delta' + \delta^2 U'_w = const = 1 \,, \quad \delta^2 U'_w = const$$

$$(\delta U_w)'\delta = const$$
,  $\frac{U_w \vartheta'_N \delta^2}{\vartheta_N} = const$ ,  $\frac{U_w \varphi'_N \delta^2}{\varphi_N} = const$ ,

d.h. unter diesen Bedingungen erhalten wir gewöhnliche Differentialgleichungen. Die willkürliche Wahl der Konstanten (const = 1) in der ersten Bedingung legt  $\delta(x)$  eindeutig fest. Ist die reibungsfreie Außenströmung (Potentialströmung) eine sogenannte *Keilströmung*, für die

$$U_w(x) = a x^m, \quad a, m = const$$

mit dem Keilöffnungswinkel  $2m\pi/(1+m)$  gilt, erhält man

$$\delta(x) = \sqrt{\frac{2}{a(m+1)}} x^{(1-m)/2} ,$$

und damit weiters

$$\vartheta_N(x) \propto x^p, \quad \varphi_N(x) \propto x^q$$

mit Werten von m, p und q in einem bestimmten Wertebereich. Damit erhält man für die Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsverteilung die *Falkner-Skan Grenzschichtgleichungen* 

$$f''' + ff'' + \frac{2m}{1+m} (1 - f'^2) = 0,$$
  
$$\hat{\vartheta}'' + \Pr(f\hat{\vartheta}' - \frac{2p}{1+m} f'\hat{\vartheta}) = 0,$$
  
$$\hat{\varphi}'' + Sc(f\hat{\varphi}' - \frac{2q}{1+m} f'\hat{\varphi}) = 0$$

mit den Randbedingungen

$$\eta = 0: \quad f = f_w, \quad f' = 0, \quad \hat{\vartheta} = \hat{\varphi} = 1$$
$$\eta \to \infty: \quad f' \to 1, \quad \hat{\vartheta} = \hat{\varphi} \to 0.$$

• Impulsübergang

Zur Berechnung der Reibwiderstandskraft eines Körpers in der Strömung integriert man über die lokale Wandschubspannung  $\tilde{\tau}_w$  (~  $\tilde{\sigma}'_{xy}|_{y=0}$ ), in dimensionsloser Ähnlichkeitsdarstellung über den *lokalen Reibungsbeiwert*  $c_f$ ,

$$c_f(x) := \frac{\tilde{\tau}_w}{\tilde{\rho}\tilde{u}_{\infty}^2/2} \sim \frac{\tilde{\mu} \left(\partial \tilde{u}/\partial \tilde{y}\right)|_{\tilde{y}=0}}{\tilde{\rho}\tilde{u}_{\infty}^2/2} = \dots = \frac{2U_w f_w''}{\delta \sqrt{Re}} = \sqrt{2a^3(m+1)} \frac{f_w''}{\sqrt{Re}} x^{(3m-1)/2} \, .$$

 $f''_w = (d^2 f/d\eta^2)|_{\eta=0}$  ist dabei der numerisch zu bestimmende Wert der Wandschubspannung.

#### Wärmeübergang

Aus der Definition

$$\hat{\vartheta} = \frac{\vartheta}{\vartheta_N} = \frac{\tilde{T} - \tilde{T}_{\infty}}{(\tilde{T}_w - \tilde{T}_{\infty})x^p}$$

lässt sich mit der Randbedingung an der Wand  $\hat{\vartheta}(0) = 1$  entweder konstante Wandtemperatur

$$T_w(x) = const. \rightarrow p = 0,$$

oder nach Uminterpretation  $(\tilde{T}_w - \tilde{T}_\infty)x^p = (\tilde{T}_w(\tilde{x}) - \tilde{T}_\infty)$  (die Bezugstemperaturdifferenz ist damit  $(\tilde{T}_w(\tilde{x} = \tilde{L}) - \tilde{T}_\infty)$ , [7], S.161) konstanter Wandwärmestrom

$$\tilde{q}_w(x) = const.: \quad \tilde{q}_w = -\tilde{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \tilde{y}}\Big|_{\tilde{y}=0} = \ldots = \frac{\tilde{\lambda}(\tilde{T}_w - \tilde{T}_\infty)}{\tilde{L}} \sqrt{\frac{a(m+1)}{2}} \sqrt{Re} \left(-\hat{\vartheta}'_w\right) x^{(2p+m-1)/2}$$

$$\rightarrow \quad p = \frac{1-m}{2}$$

vereinbaren. Für den Wärmeübergang folgt mit der Definition der (*lokalen*) Nusselt-Zahl Nu das Ähnlichkeitsgesetz

$$Nu := \frac{\tilde{q}_w \tilde{L}}{\tilde{\lambda} (\tilde{T}_w - \tilde{T}_\infty)} = \sqrt{\frac{a(m+1)}{2}} \sqrt{Re} \left( -\hat{\vartheta}'_w \right) \begin{cases} x^{(m-1)/2} , & \tilde{T}_w = const , \\ 1 , & \tilde{q}_w = const , \end{cases}$$

d.h. es gilt i.a. Nu = Nu(x, Re, Pr). Für die konkrete Bestimmung der Nusselt-Zahl benötigt man neben der Kenntnis der reibungsfreien Außenströmung (a, m) die numerische Lösung der Strömungsgrenzschicht (Stromfunktion f) sowie der Temperaturgrenzschicht (Temperaturverteilung  $\hat{\vartheta}$ , insbesondere den Temperaturgradienten an der Wand  $\hat{\vartheta}'_w = d\hat{\vartheta}/d\eta|_{\eta=0}$ ).

#### Stoffübergang

Wir betrachten den Stoffübergang (die Verdunstung an der Wand in *y*-Richtung) unter der Annahme *einseitiger Diffusion*. Aus der Definition der Schwerpunktsgeschwindigkeit für ein Binärgemisch (hier: Wasserdampf-Luft) und dem Fickschen Gesetz folgt für die Komponente in *y*-Richtung:

$$\begin{split} \tilde{\rho}\tilde{v} &= \tilde{\rho}_{A}\tilde{v}_{A} + \tilde{\rho}_{B}\tilde{v}_{B} = \underbrace{\tilde{\rho}_{A}(\tilde{v}_{A} - \tilde{v})}_{\tilde{j}_{A}} + \check{\rho}_{A}\tilde{v} + \underbrace{\tilde{\rho}_{B}}_{\tilde{\rho} - \tilde{\rho}_{A}}\tilde{v}_{B} \quad \rightarrow \quad (\tilde{\rho} - \tilde{\rho}_{A})\tilde{v} = \tilde{j}_{A} + (\tilde{\rho} - \tilde{\rho}_{A})\tilde{v}_{B} \\ \\ \rightarrow \quad \tilde{v} = \tilde{v}_{B} + \frac{\tilde{j}_{A}}{\tilde{\rho} - \tilde{\rho}_{A}} = \tilde{v}_{B} - \frac{\tilde{\rho}\tilde{D}}{\tilde{\rho} - \tilde{\rho}_{A}}\frac{\partial c_{A}}{\partial \tilde{y}} = \tilde{v}_{B} - \frac{\tilde{D}}{1 - c_{A}}\frac{\partial c_{A}}{\partial \tilde{y}} \,. \end{split}$$

Einseitige Diffusion ist durch  $\tilde{v}_B \equiv 0$  charakterisiert, die Auswertung obiger Beziehung an der Wand führt auf die *Eckert-Schneider-Bedingung* für die Schwerpunktsgeschwindigkeit ( $c_A = c$ ):

$$\tilde{v}_w = -\frac{\tilde{D}}{1 - c_w} \left. \frac{\partial c}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=0}$$

,

bzw. in dimensionsloser Form

$$v_w = \frac{c_w - c_\infty}{Sc (1 - c_w)} \sqrt{\frac{a(m+1)}{2}} \left(-\hat{\varphi}'_w\right) x^{q + (m-1)/2}.$$

Der Vergleich mit

$$v_w = -(\delta U_w)' f_w \propto x^{(m-1)/2}$$

für selbstähnliche (Falkner-Skan) Grenzschichten lässt hier nur

$$q = 0 \quad \rightarrow \quad c_w = const \,,$$

d.h. konstante Konzentration an der Wand zu. Für den Stoffübergang erhält man daher mit der Definition der (*lokalen*) *Sherwood-Zahl Sh* das Ähnlichkeitsgesetz

$$Sh := \frac{\tilde{j}_w \tilde{L}}{\tilde{\rho} \tilde{D}(c_w - c_\infty)} = \sqrt{\frac{a(m+1)}{2}} \sqrt{Re} \left(-\hat{\varphi}'_w\right) x^{(m-1)/2}, \quad c_w = const,$$

i.a. also Sh = Sh(x, Re, Sc).

(c)

Die reibungsfreie Außenströmung um eine dünne, nichtangestellte Platte liefert  $U_w(x) = 1$ , d.h. a = 1, m = 0 und  $\delta(x) = \sqrt{2x}$ . Für konstante Wandtemperatur  $\tilde{T}_w$  (p = 0) und konstante Wandkonzentration  $c_w$  (q = 0) reduzieren sich die Gleichungen zur Berechnung der Strömungs-, Temperatur- und Konzentrationsgrenzschicht weiter: Impulsbilang (in z. Bishtung). *Plasius Cleichung*:

Impulsbilanz (in x-Richtung), Blasius-Gleichung:

$$f''' + ff'' = 0$$
,  $f(0) = f_w$ ,  $f'(0) = 0$ ,  $f(\eta \to \infty) \to 1$ ,

Leistungsbilanz:

$$\hat{\vartheta}'' + \Pr f \hat{\vartheta}' = 0, \quad \hat{\vartheta}(0) = 1, \quad \hat{\vartheta}(\eta \to \infty) \to 0,$$

partielle Massenbilanz:

$$\hat{\varphi}'' + Sc f \hat{\varphi}' = 0, \quad \hat{\varphi}(0) = 1, \quad \hat{\varphi}(\eta \to \infty) \to 0$$

Impuls-, Wärme- und Stoffübergang sind unter den gegebenen Bedingungen daher durch

$$c_f(x, \mathbf{R}\mathbf{e}) = \sqrt{\frac{2}{x}} \frac{f_w''}{\sqrt{\mathbf{R}\mathbf{e}}}, \quad Nu(x, \mathbf{R}\mathbf{e}, \mathbf{P}\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{\mathbf{R}\mathbf{e}}}{\sqrt{2x}} \left(-\hat{\vartheta}_w'\right), \quad Sh(x, \mathbf{R}\mathbf{e}, \mathbf{S}\mathbf{c}) = \frac{\sqrt{\mathbf{R}\mathbf{e}}}{\sqrt{2x}} \left(-\hat{\varphi}_w'\right)$$

charakterisiert. Numerische Rechnungen liefern  $f''_w \approx 0.4696$  und in der Grenze vernachlässigbaren Stoffstromes durch die Wand  $f_w \rightarrow 0$ , [7], S.162:

$$b = Pr, Sc$$
 $\rightarrow 0$  $0.1$  $0.7$ 7 $10$  $\rightarrow \infty$  $(-\hat{\vartheta}'_w), (-\hat{\varphi}'_w)$  $0.798 b^{1/2}$  $0.198$  $0.4139$  $0.9135$  $1.0297$  $0.479 b^{1/3}$ 

(d)

Einige Stoffeigenschaften, welche bei der Betrachtung der Verdunstung von Wasser an Luft wesentliche sind:

*Sättigungsdampfdruck*  $\tilde{p}_s$ , bestimmbar aus der integrierten Form der *Clausius-Clapeyron-Gleichung* unter der Annahme von Idealgasverhalten:

$$\tilde{p}_s = \exp\left(A - \frac{\tilde{B}}{\tilde{T}}\right), \quad (\tilde{p}_s) = \operatorname{bar}, \quad (\tilde{T}) = \mathrm{K}, \quad A = 14.46, \quad \tilde{B} = 5340.13\mathrm{K},$$

Dichte  $\tilde{\rho}_L$  und dynamische Viskosität  $\tilde{\mu}_L$  von (trockener) Luft:

$$\tilde{\rho}_L(\tilde{T}) = \tilde{\rho}_{L0}(1 - \theta - \theta^2 + \cdots), \quad \tilde{\mu}_L(\tilde{T}) = \tilde{\mu}_{L0}(1 + 0.775 \,\theta - 0.176 \,\theta^2 + \cdots),$$

mit

$$\tilde{\rho}_{L0} = 1.204 \,\mathrm{kg/m^3}, \quad \tilde{\mu}_{L0} = 18.19 \times 10^{-6} \,\mathrm{Pa\,s}, \quad \theta = \frac{T - T_{\infty}}{\tilde{T}_{\infty}}$$

bei den Referenzwerten  $\tilde{T}_{\infty} = 293 \text{ K}$  und  $\tilde{p}_{\infty} = 1 \text{ bar.}$ Wärmeleitfähigkeit  $\tilde{\lambda}$  und spezifische Wärmekapazität  $\tilde{c}_p$  von Luft:

$$\tilde{\lambda} = 0.026 \,\mathrm{W/(m\,K)}\,, \quad \tilde{c}_p = 1010 \,\mathrm{J/(kg\,K)}$$

Binärer Diffusionskoeffizient  $\tilde{D}$  für Luft-Wasserdampfgemisch:

$$\tilde{D} = 2.5 \times 10^{-5} \,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$$

Bestimmung der Dichte von *feuchter* Luft (Idealgasverhalten,  $\tilde{p}, \tilde{T} = const$ ):

trockene Luft:

$$\tilde{p} = \tilde{\rho}_L \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{\tilde{M}_L} \tilde{T} \,,$$

feuchte Luft:

$$\tilde{p}_L = \tilde{\rho}_L^* \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{\tilde{M}_L} \tilde{T}, \quad \tilde{p}_W = \tilde{\rho}_w \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{\tilde{M}_W} \tilde{T}, \quad \tilde{p} = \tilde{p}_L + \tilde{p}_W,$$

~

Dichte feuchter Luft  $\tilde{\rho}_{fL}$ :

$$\tilde{\rho}_{fL} = \tilde{\rho}_L^* + \tilde{\rho}_W = \underbrace{\frac{\tilde{\rho}_L^*}{\tilde{\rho}_L}}_{\tilde{p}_L/\tilde{p}} \tilde{\rho}_L + \frac{\tilde{p}_W}{\tilde{\mathcal{R}}\tilde{T}} \tilde{M}_W = \frac{\tilde{p} - \tilde{p}_W}{\tilde{p}} \tilde{\rho}_L + \frac{\tilde{p}_W}{\tilde{p}} \frac{M_W}{\tilde{\mathcal{R}}\tilde{T}} \underbrace{\tilde{p}}_{\tilde{\rho}_L} \frac{\tilde{\mathcal{R}}\tilde{T}}{\tilde{M}_L} = \tilde{\rho}_W \left[1 - \frac{\tilde{p}_W}{\tilde{M}} \left(1 - \frac{\tilde{M}_W}{\tilde{M}}\right)\right] \quad \Rightarrow \quad \tilde{\rho}_W \leqslant \tilde{p}_L$$

$$= \tilde{\rho}_{fL} = \tilde{\rho}_L \left[ 1 - \frac{p_W}{\tilde{p}} \left( 1 - \frac{M_W}{\tilde{M}_L} \right) \right] \quad \to \quad \tilde{\rho}_{fL} < \tilde{\rho}_L$$

wegen der verschiedenen Molmassen von  $\tilde{M}_W = 18.02 \text{ kg/kmol}$  und  $\tilde{M}_L = 28.95 \text{ kg/kmol}$ . Wandkonzentration:

$$c_w = \frac{\tilde{\rho}_W}{\tilde{\rho}_{fL}} = \frac{\tilde{p}_W M_W}{\tilde{\mathcal{R}}\tilde{T}} \frac{1}{\tilde{\rho}_{fL}} \,.$$

Man erhält für  $\tilde{p} = 1$  bar:

$\tilde{T}$	$\tilde{p}_s = \tilde{p}_W$	$ ilde{ ho}_L$	$\tilde{ ho}_{fL}$	$\tilde{ ho}_W$	$c_w$
$^{\circ}\mathrm{C}$	mbar	$\rm kg/m^3$	$\rm kg/m^3$	$g/m^3$	1
5	8.75	1.262	1.258	6.8	0.0054
10	12.2	1.244	1.238	9.4	0.0076
15	17.0	1.224	1.216	12.8	0.0105
20	23.4	1.204	1.193	17.3	0.0145
25	31.7	1.183	1.169	23.1	0.0197
30	42.6	1.162	1.143	30.5	0.0267
35	56.7	1.139	1.115	39.9	0.0358

(*i*) Näherung  $v_w \approx 0$ , Berechnung der Strömungsgrenzschicht *ohne* Kopplung an das Stoffübergangsproblem ( $f_w = 0$ ):

Unter Verwendung der Eckert-Schneider-Bedingung und des Ausdruckes für die Sherwood-Zahl ergibt sich

$$\tilde{v}_w = \frac{v_w \tilde{u}_\infty}{\sqrt{Re}} = \frac{\tilde{u}_\infty}{\sqrt{Re}} \frac{(c_w - c_\infty)}{Sc (1 - c_w)} \frac{(-\hat{\varphi}'_w)}{\sqrt{2x}} = \frac{\tilde{u}_\infty (c_w - c_\infty)}{Sc (1 - c_w)} \frac{Sh}{Re},$$

für die Massenstromdichte durch die Wand daher

$$\tilde{\rho}_W \tilde{v}_w = \tilde{\rho}_W \tilde{u}_\infty \frac{(c_w - c_\infty)}{(1 - c_w)} \frac{Sh}{Sc \, Re}$$

Für den Gesamtwassermassenstrom  $\tilde{\dot{m}}_W$  durch die Wand erhält man

$$\tilde{\dot{m}}_W = \int_O \tilde{\rho}_W \tilde{v}_w \,\mathrm{d}\tilde{O} = \tilde{b} \int_0^{\tilde{L}} \tilde{\rho}_W \tilde{v}_w \,\mathrm{d}\tilde{x} = \tilde{\rho}_W \tilde{u}_\infty \frac{(c_w - c_\infty)}{(1 - c_w)} \frac{\tilde{b}\tilde{L}}{Sc \, Re} \underbrace{\int_0^1 Sh(x) \,\mathrm{d}x}_{\bar{Sh}},$$

hier bezeichnet Sh die globale Sherwood-Zahl des betrachteten Stoffübergangproblems. Im vorliegenden Fall ist

$$\bar{Sh} = \frac{(-\hat{\varphi}'_w)\sqrt{Re}}{\sqrt{2}} \int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{x}} = \sqrt{2} \, (-\hat{\varphi}'_w)\sqrt{Re} \, .$$

In der Zeitspanne  $\Delta t$  wird  $\tilde{\dot{m}}_W \Delta t$  Wassermasse verdunstet.

(*ii*)  $v_w \neq 0$ :

Aus der Eckert-Schneider-Bedingung der einseitigen Diffusion und der Selbstähnlichkeit der Plattenströmung sieht man gut die Kopplung zwischen Strömungs- und Konzentrationsfeld, welche bei der Lösung i.a. berücksichtigt werden muss:

$$v_w = \frac{(c_w - c_\infty)}{Sc \left(1 - c_w\right)} \frac{(-\hat{\varphi}'_w)}{\sqrt{2x}} = -\frac{f_w}{\sqrt{2x}},$$

• Iteratives, numerisches Lösungsverfahren

mögliche Vorgangsweise: Vorgabe von  $v_w$  bzw.  $f_w$  - z.B. aus (*i*) -, Lösen der Strömungsgrenzschichtgleichung  $f(\eta)$ , Lösen der Konzentrationsgrenzschichtgleichung  $\hat{\varphi}(\eta)$ , daraus Bestimmung des Konzentrationsgradienten an der Wand  $\hat{\varphi}'_w$ , aus Eckert-Schneider-Bedingung neuerliche Bestimmung von  $f_w$ , usf., bis Konvergenz erhalten wird.

• Störungsrechnung für  $v_w, f_w \ll 1$ 

Setzt man folgende reguläre asymptotische Entwicklungen der Feldgrößen für kleine  $f_w$ 

$$f(\eta) = f_0(\eta) + f_w f_1(\eta) + O(f_w^2),$$
  
$$\hat{\varphi}(\eta) = \hat{\varphi}_0(\eta) + f_w \hat{\varphi}_1(\eta) + O(f_w^2)$$

in die entsprechenden Differentialgleichungen (und Randbedingungen) ein, ordnet nach gleichen Potenzen in  $f_w$ , dann ergibt sich unter Berücksichtigung von

$$Sh = Sh_0 + f_w Sh_1 + O(f_w^2)$$

in führender Ordnung (entspricht  $f_w = 0$ , siehe Fall (*i*), Tabelle mit  $\hat{\varphi}'_{0w} \equiv \hat{\varphi}'_w$ )

$$Sh_0 = \frac{\sqrt{Re}}{\sqrt{2x}} \left( -\hat{\varphi}'_{0w} \right),$$

und in erster Ordnung

$$Sh_1 = rac{\sqrt{Re}}{\sqrt{2x}} \left( -\hat{\varphi}'_{1w} 
ight).$$

Mit

$$f_w = -\sqrt{2x} v_w = -\frac{Sh_0 \sqrt{2x}}{\sqrt{Re}} \frac{(c_w - c_\infty)}{Sc (1 - c_w)} + O(f_w^2)$$

wird

$$\frac{Sh}{Sh_0} = 1 - \frac{(-\hat{\varphi}'_{1w})}{Sc} \frac{(c_w - c_\infty)}{(1 - c_w)} + O(f_w^2),$$

siehe Tabelle ([7], S.358).

Endgültig folgt damit für den Gesamtmassenstrom

$$\tilde{\dot{m}}_W = \tilde{\dot{m}}_{0W} \left( 1 - \frac{(-\hat{\varphi}'_{1w})}{Sc} \frac{(c_w - c_\infty)}{(1 - c_w)} + O(f_w^2) \right),$$

d.h. die Berücksichtigung von  $v_w$  führt zu einer Veringerung des Massenstromes gegenüber der Näherung  $v_w \approx 0$ . Beispielsweise ergibt sich für Sc = 0.6,  $c_\infty = 0$  und  $c_w = 0.026$  ein Gesamtmassenstromverhältnis  $\tilde{m}_W/\tilde{m}_{0W} \approx 0.98$ , d.h. eine Abnahme von 2%.

25.

(a) Für ein inkompressibles Newtonsches Fluid lautet die Bewegungsgleichung (4) unter der Annahme stationärer Verhältnisse und konstanter Stoffwerte (Navier-Stokes-Gleichung)

$$\rho v_i \frac{\partial v_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 v_j}{\partial x_i \partial x_i} + \rho g_j$$

Setzen wir ebene Parallelströmung, d.h.  $\vec{v} = (u, v = 0)^T$  voraus und vernachlässigen die (durch die Schwerkraft verursachte) hydrostatische Druckverteilung, nehmen also an, dass der Druck im Film gleich dem (konstanten) Umgebungsdruck ist, folgt mit der Massenbilanz

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \underbrace{\frac{\partial v}{\partial y}}_{0} = 0 \quad \rightarrow \quad u = u(y)$$

für die Bewegungsgleichung in x-Richtung

$$\rho u \underbrace{\frac{\partial u}{\partial x}}_{0} + \rho \underbrace{v}_{0} \frac{\partial u}{\partial y} = \mu \left( \underbrace{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{0} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \rho g \quad \to \quad \mu \frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d} y^2} + \rho g = 0 \,.$$

Als Randbedingungen verwenden wir die Haftbedingung an der Wand und die Forderung nach Schubspannungsfreiheit an der freien Oberfläche (dynamische Verträglichkeitsbedingung):

$$y = 0: \quad u = 0,$$
  
$$y = \delta: \quad \sigma'_{xy} = \mu \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y} = 0.$$

Damit ergibt sich als Lösung der Bewegungsgleichung die parabelförmige Geschwindigkeitsverteilung im Flüssigkeitsfilm

$$u(y) = \frac{\rho g}{\mu} \left( \delta y - \frac{y^2}{2} \right)$$

(b) konvektiver Stoffübergang Wand-Film

Aus der partiellen Massenbilanz (2) folgt unter den gegebenen Annahmen für ein inertes Binärgemisch ( $c_A = c, c_B = 1 - c$ ) unter Verwendung des Fickschen Gesetzes

$$u\frac{\partial c}{\partial x} = D\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}.$$

Hierbei wurde weiters angenommen, dass der größte Konzentrationsgradient quer zur Wand auftritt und daher der Diffusionsstrom in x-Richtung gegenüber dem quer zur Wand vernachlässigbar klein ist. Besitzt der Stoffübergang an der Wand Grenzschichtcharakter, d.h. ist die Eindingtiefe des Stoffes A in den Film verglichen mit der Filmdicke  $\delta$  über die gesamte Lauflänge klein, kann die Geschwindigkeitsverteilung in dem für den Stoffübergang relevanten wandnahen Bereich linear approximiert werden:

$$u(y) = \frac{\rho g \delta}{\mu} y + O(y^2), \quad y \ll \delta.$$

Damit erhält man die *Konvektions-Diffusionsgleichung* (das Geschwindigkeitsfeld wird als unabhängig vom Stoffübergang angesehen)

$$y \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\mu D}{\rho g \delta} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \,,$$

die zugehörigen Anfangs- und Randbedingungen lauten:

$$\begin{aligned} x &= 0: \qquad c = 0, \\ y &= 0: \qquad c = c_w, \\ y &\to \infty: \qquad c \to 0. \end{aligned}$$

Durch die Annahme einer dünnen Grenzschicht 'verliert' man für das Stoffübergangsproblem globale Längenmaßstäbe (die Grenzschicht 'sieht' die freie Filmoberfläche und das Plattenende nicht), es legt sich die Suche nach einer Ähnlichkeitslösung nahe. Wir setzen

$$c(x,y) = c_w f(\eta), \quad \eta = a \frac{y}{x^{\alpha}}$$

mit den Unbekannten a und  $\alpha$  und erhalten nach Eintragen in die Konvektions-Diffusionsgleichung

$$\frac{\alpha}{a} x^{\alpha-1} \eta^2 f' + \frac{a^2 \mu D}{\rho g \delta} x^{-2\alpha} f'' = 0 ,$$

woraus

$$\alpha = \frac{1}{3}, \quad a = \left(\frac{\rho g \delta}{3\mu D}\right)^{1/3}$$

folgt. Die verbleibende Gleichung  $f'' + \eta^2 f' = 0$  mit den Randbedingungen f(0) = 1,  $f(\infty) = 0$  hat die Lösung (z.B. Mathematica)

$$f(\eta) = \frac{\Gamma(\frac{1}{3}, \frac{\eta^3}{3})}{\Gamma(\frac{1}{3})},$$

hier bedeuten

$$\Gamma(b,x) = \int_x^\infty t^{b-1} e^{-t} dt, \quad \Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$$

die *unvollständige Gamma-Funktion* bzw. die *Gamma-Funktion* für reelle, positive x, welche die Funktionalgleichung  $\Gamma(x + 1) = x \Gamma(x)$  erfüllt.

Für den Stofftransport durch die Wandoberfläche  $\vec{j}_A(x,y=0)=j_w(x)\,\vec{e_y}$  erhält man

$$j_w(x) = (\rho_A v_A)|_{y=0} = -\rho D \frac{\partial c}{\partial y}\Big|_{y=0} = -\rho D c_w \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\eta}\frac{\partial\eta}{\partial y}\right)\Big|_{\eta=0} = \rho D c_w \frac{3^{1/3}}{\Gamma(\frac{1}{3})} \left(\frac{\rho g \delta}{\mu D}\right)^{1/3} x^{-1/3}$$
$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\eta} = -\frac{3^{2/3}}{\Gamma(\frac{1}{3})} e^{-\eta^3/3}$$

unter Verwendung der Leibniz-Regel für die Differentiation von Parameterintegralen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \int_{a(x)}^{b(x)} \phi(t,x) \,\mathrm{d}t = \int_{a(x)}^{b(x)} \frac{\partial \phi}{\partial x} \,\mathrm{d}t + \phi(b,x) \,b'(x) - \phi(a,x) \,a'(x) \,.$$

Die lokale Sherwood-Zahl mit der charakteristischen Konzentrationsdifferen<br/>z $\Delta c=c_w-c_\infty=c_w$ ergibt sich damit zu

$$Sh(x) = \frac{j_w(x)\delta}{\rho D\Delta c} = \delta \frac{3^{1/3}}{\Gamma(\frac{1}{3})} \left(\frac{\rho g\delta}{\mu D}\right)^{1/3} x^{-1/3}$$

Mit den Definitionen der mittleren Strömungsgeschwindigkeit  $\bar{u}$  im Film

$$\bar{u} = \frac{1}{\delta} \int_0^\delta u(y) \, \mathrm{d}y = \frac{\rho g \delta^2}{3\mu}$$

der Reynolds- und Schmidt-Zahlen

$$Re = \frac{\bar{u}\rho\delta}{\mu}, \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D}$$

erhält man mit

$$Re\,Sc = \frac{\bar{u}\delta}{D} = \frac{\delta^3\rho g}{3\mu D}$$

die globale Sherwood-Zahl

$$\bar{Sh} = \frac{\bar{j}_w \delta}{\rho D c_w} = \frac{1}{L} \int_0^L Sh \, \mathrm{d}x = \frac{3^{5/3}}{2 \,\Gamma(\frac{1}{3})} \left( \operatorname{Re} Sc \, \frac{\delta}{L} \right)^{1/3}$$

(c) konvektiver Stoffübergang Gas-Film

In Analogie zu (b) gilt die Konvektions-Diffusionsgleichung mit gegebenem Filmgeschwindigkeitsprofil

$$u(y)\frac{\partial c}{\partial x} = D\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}, \quad u(y) = \frac{\rho g}{\mu}\left(\delta y - \frac{y^2}{2}\right)$$

Wird die typische Eindingtiefe des Stoffes A aus der Gasphase in den Film wieder als klein gegen die Filmdicke  $\delta$  angenommen (Grenzschichtcharakter), dann kann man für die Geschwindigkeit in der Nähe der Filmoberfläche näherungsweise

$$u \to u_{max} = u(\delta) = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu}$$

setzen. Man erhält damit die Gleichung

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{D}{u_{max}} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \,,$$

welche unter den Anfangs- und Randbedingungen

 $\begin{aligned} x &= 0: \qquad c = 0, \\ y &= 0: \qquad c = c_0, \\ y &\to \infty: \quad c \to 0 \end{aligned}$ 

zu lösen ist. Dieses Problem ist vergleichbar mit dem aus Bsp. 15 (instationäre Diffusion im Halb-

raum, Laplace-Transformation), mit den entsprechenden Ersetzungen lautet die Lösung

$$c(x,y) = c_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{y}{2}\sqrt{\frac{u_{max}}{Dx}}\right)$$
.

Die Diffusionsstromdichte  $\vec{j}_A(x, y = 0) = j_0(x) \vec{e}_y$  wird daraus zu (Ableitung der Fehlerfunktion siehe Bsp. 18)

$$j_0(x) = (\rho_A v_A)|_{y=0} = -\rho D \left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{y=0} = c_0 \rho \sqrt{\frac{D u_{max}}{\pi x}} \,.$$

Für die lokale und globale Sherwood-Zahl erhält man

$$Sh(x) = \frac{j_0(x)\delta}{\rho D c_0} = \delta \sqrt{\frac{u_{max}}{\pi D x}}, \quad \bar{Sh} = \frac{1}{L} \int_0^L Sh(x) \, \mathrm{d}x = 2\delta \sqrt{\frac{u_{max}}{\pi D L}},$$

und über

$$Re = \frac{u_{max}\delta\rho}{\mu}, \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D}, \quad Re \,Sc = \frac{u_{max}\delta}{D}$$

das Resultat

$$\bar{Sh} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \operatorname{Re} Sc \, \frac{\delta}{L} \right)^{1/2}$$