

TEKST NR 431

2004

En numerisk undersøgelse af

**Sammenhængen mellem termisk
admittans og frekvensafhængig
varmekapacitet i seje væsker**

Eva Uhre

Vejleder: Tage E. Christensen

TEKSTER fra

IMFUFA

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER

INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES
FUNKTIONER I UNDERSVINGNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA
Roskilde Universitetscenter
Postbox 260
DK-4000 Roskilde
Tlf. 4674 2263 / Fax. 4674 3020 / email: imfufa@ruc.dk

Eva Uhré: En numerisk undersøgelse af sammenhængen mellem termisk admittans og frekvensafhængig varmekapacitet i seje væsker.

Et 3. modul fysikprojekt.

IMFUFA-tekst nr. 431/2004

80 sider

ISSN 0106-6242

Dette projekt handler om den frekvensafhængige, komplekse varmekapacitet for seje væsker. Projektet går ud på at undersøge, hvordan den teoretiske sammenhæng er, mellem den termiske admittans, der måles ved specifik varmekapacitetsspektroskopi og den frekvensafhængige varmekapacitet.

Denne sammenhæng vil generelt afhænge af eksperimentets geometri, samt af de termiske egenskaber (varmekapacitet og varmeledningsevne) af væsken man mäter på. Når man mäter på seje væsker vil sammenhængen desuden også afhænge af de mekaniske egenskaber af væsken, idet det mekaniske og termiske respons i denne situation er koblet. Denne afhængighed af de mekaniske og termiske egenskaber kaldes det koblede problem. Afhængigheden af eksperimentets geometri kaldes det termiske randeffektproblem. Disse to problemer undersøges numerisk i dette projekt.

Det termiske randeffektproblem undersøges numerisk for en eksperimentel opstilling benyttet af Claus Behrens der er Ph.D studerende på IMFUFA, RUC.

De koblede partielle differentialligninger der styrer det koblede problem formuleres dimensionsløst. En lidt modificeret udgave af dette system løses numerisk for en én- og to-dimensonal geometri.

Forord

Denne rapport er det fysiske resultat af et projektarbejde gennemført på 3. modul på fysikoverbygningen på Roskilde Universitetscenter i efteråret 2002. Projektet er et såkaldt frit projekt, der ifølge studieordningen skal opfylde følgende:

Formålet med projektet er, at den studerende når frem til forskningsfronten inden for en problemstilling, der angår faget fysik.

Jeg har valgt at beskæftige mig med en problemstilling indenfor området seje væskers dynamik.

Jeg vil gerne benytte lejligheden til at takke Claus Behrens for samtaler om 3ω -metoden og fordi han har introduceret mig til sit eksperiment, Bo Jakobsen og Kristine Niss, som har været uvurderlige sparringspartnere undervejs, Stine Timmermann for figurhjælp og gennemlæsning, FEM-gruppen (Sofie, Ingunn og Jacob) for udbytterig snak om Femlab, god mad og godt selskab i datastuen, og sidst, men ikke mindst min vejleder Tage Christensen for god vejledning gennem forløbet.

RUC, januar 2003

Eva Uhre

I forbindelse med udgivelsen af nærværende rapport som IMFUFA-tekst er der foretaget enkelte rettelser af fejl og formuleringer i den oprindelige rapport.

April 2004

Indhold

1 Indledning	1
1.1 Problemformulering	4
1.2 Metode	4
1.3 Rapportens opbygning	5
1.4 Angående vektor- og tensornotation	5
2 Seje væsker	7
2.1 Lineær viskoelasticitetsteori	8
2.2 Elasticitet-viskoelasticitet korrespondens	9
2.3 Debye-relaksation	10
3 Måling af frekvensafhængig varmekapacitet	13
4 De termomekaniske ligninger	17
4.1 Stress	17
4.2 Strain	18
4.3 Bevægelsesligningerne for et termoelastisk system	19
4.4 Diffusionsligningen	22
4.5 Termoviskoelasticitet	23
4.6 Opsamling	24
4.6.1 Ligningerne for det koblede problem	24
4.6.2 Ligningerne for det rent termiske randeffektproblem	24
5 Det termiske problem i en dimension	27
5.1 Den én-dimensionale analytiske løsning	27
5.1.1 Den termiske admittans for adiabatiske randbetingelser	29
5.1.2 Den termiske admittans for isoterme randbetingelser	30
5.1.3 1D diffusion i to forskellige materialer	30
5.2 Den endimensionale numeriske løsning	32
5.2.1 Geometrien	32
5.2.2 Ligningerne og randbetingelserne	33
5.2.3 Løsningen	33
5.2.4 Den termiske admittans	34
5.2.5 Randbetingelsen for varmestrømmen	37
5.3 Opsamling	38

6 Numerisk løsning af det tre-dimensionale termiske randeffektproblem	39
6.1 Den modellerede geometri	39
6.2 Opstilling af model i Femlab	40
6.2.1 Geometrien	40
6.2.2 Ligningerne	41
6.2.3 Randbetingelserne	43
6.3 Løsninger	44
6.3.1 Den termiske admittans for $k_\lambda = \frac{1}{3}$ og $k_c = 2$	44
6.3.2 Løsning for en debye-relakserende varmekapacitet	47
6.4 Opsamling	50
6.5 Fit af varmekapacitet	51
7 Numerisk løsning af det koblede problem	53
7.1 Ligningssystemet reduceres	53
7.1.1 Ligningssystemet uden kobling	55
7.2 Den modellerede geometri	56
7.3 Løsning af det koblede problem i én dimension i Femlab	58
7.3.1 Ligningerne og randbetingelserne	59
7.3.2 Den termiske admittans	59
7.4 Opstilling af to-dimensional model i Femlab	61
7.4.1 Geometrien	61
7.4.2 Ligningerne	62
7.4.3 Randbetingelserne	63
7.4.4 Resultater	65
7.5 Opsamling	69
8 Opsamling og konklusion	71
Litteratur	73

1 Indledning

Seje væsker er karakteriseret ved, at dynamikken er 'bremset'. En væske bliver dej, når den på et tidspunkt bliver kold 'nok'. I almindelighed skal en væske være underafkølet for at være kold nok til at blive dej. Når relaksationstiderne bliver længere end den eksperimentelle tidsskala vil dynamikken forekomme helt frosset og væsken vil være ude af ligevægt. En underafkølet væske ude af ligevægt kaldes en glas. Mekanismerne bag underafkølede/seje væskers dynamiske egenskaber er endnu ikke velforståede.

Lineær termomekanisk relaksation i seje væsker er beskrevet af de termovisko-elastiske responsfunktioner, som for eksempel den isobare udvidelseskoefficient α_p , den isokore trykstigningskoefficient β_V , bulkmodulet K og specifik varmekapacitet. Kendes tre af disse, kan de øvrige responsfunktioner findes udfra dem (Christensen & Olsen, 1997).

Harmonisk varierende, små perturbationer af et systems temperatur og relative volumenændring $\varepsilon = \frac{\Delta V}{V}$, vil føre til små harmoniske ændringer af entropidensiteten ρ_S og trykket p , der afhænger af responsfunktionerne β_V , K_T og c_V på følgende måde

$$\begin{pmatrix} d\rho_S \\ -dp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T_0} c_V & \beta_V \\ -\beta_V & K_T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dT \\ d\varepsilon \end{pmatrix} \quad (1)$$

(Christensen & Olsen, 1997), hvor alle indgående responsfunktioner er komplekse og frekvensafhængige. Ved at måle de frekvensafhængige responsfunktioner kan man altså få en viden om relaksationen i underafkølede væsker, der kan bruges til at teste modeller til beskrivelse af dynamikken.

Dette projekt handler om måling af én bestemt responsfunktion for underafkølede væsker; den frekvensafhængige varmekapacitet. Inden læseren når at blive alt for spændt, må jeg dog hellere skynde mig at afsløre, at projektet ikke har handlet om fremskaffelse af egne eksperimentelle resultater, og rapporten derfor heller ikke gør det. Projektet går derimod ud på at undersøge, hvordan den teoretiske sammenhæng er mellem den responsfunktion, man mäter ved en bestemt målemetode, nemlig den termiske admittans, og den responsfunktion man gerne vil finde, nemlig den frekvensafhængige varmekapacitet. Denne målemetode, der kaldes specifik varmekapacitets-spektroskopি, vil blive præsenteret i kapitel 3.

I denne type eksperiment sendes en harmonisk varierende varmestrøm ud i væsken, hvorefter den resulterende temperaturændring måles. Den termiske admittans er

defineret som forholdet mellem varmestrømmens og temperaturændringens komplekse amplitude ved varmepladen, $Y = \frac{J_{\omega}}{T_{\omega}}$. Den teoretiske sammenhæng mellem den termiske admittans og den frekvensafhængige varmekapacitet er hos blandt andet (Birge et al., 1997), (Menon, 1996), (Moon et al., 1996) fundet ved løsning af den én-dimensionale diffusionsligning på kompleks form

$$i\omega c_p(\omega)T_{\omega} + \lambda \frac{\partial^2 T_{\omega}}{\partial x^2} = 0, \quad (2)$$

hvor $c_p(\omega)$ er den frekvensafhængige isobare varmekapacitet, λ er varmelednings-
evnen og T_{ω} er den komplekse amplitude af den harmonisk varierende temperatur.
Ligningen løses for T_{ω} , hvorved man kan finde et udtryk for den termiske admittans
som funktion af frekvens, varmekapacitet og varmeledningsevne for høje frekven-
ser:

$$Y(\omega) = \sqrt{-i\omega c_p \lambda}. \quad (3)$$

Dette udtryk inverteres herefter, så c_p kan findes udfra de målte admittanser. Denne fremgangsmåde er dog problematisk af flere grunde.

For det første er den approksimation man laver, når man antager, at diffusionen kun foregår i én dimension, kun god for 'høje' frekvenser¹. For lave frekvenser vil diffusionen foregå i tre dimensioner. Når der er diffusion i tre dimensioner afhænger sammenhængen mellem den termiske admittans og varmekapaciteten af den anvendte geometri og eksperimentets randbetingelser på en mere kompliceret måde, end i det én-dimensionale tilfælde. Dette kaldes fremover *det termiske randeffektproblem*. På grund af dette er der en nedre grænse for frekvensen i denne metode. Kan man tage højde for det termiske randeffektproblem er det altså muligt at måle længere ned i frekvens.

For det andet kan man diskutere om det i dette eksperiment er meningsfyldt at tale om c_p . Hos for eksempel (Birge et al., 1997), (Menon, 1996) og (Moon et al., 1996) antages det, at det er den isobare varmekapacitet, der måles og det er derfor denne, der indgår i ligning 2 og 3. For en dej væske vil termisk påvirkning imidlertid også give anledning til mekanisk relaksation i væsken. Væsken deformeres, hvilket giver anledning til shear-spændinger, der kun langsomt relakserer. Væsken kan altså ikke længere siges at være under konstant tryk. Den mekaniske relaksation påvirker igen den termiske relaksation og for at have en fuldstændig beskrivelse af væskens termiske respons er det derfor i tre dimensioner nødvendigt at betragte fire koblede partielle differentialligninger i stedet for den almindelige diffusionsligning (ligning 2). Disse er bevægelsesligningerne givet ved Newtons 2. lov og en udvidet version af diffusionsligningen, hvor der tages højde for deformationens indflydelse på temperaturen. Dette kaldes fremover *det koblede problem*.

(Christensen & Olsen, 1997) finder, at det på grund af koblingen mellem den termiske og den mekaniske relaksation i en underafkølet væske ikke kan være c_p ,

¹Hvad der menes med høje frekvenser vil jeg komme tilbage til senere.

der måles i denne type eksperiment, men derimod en blandet termoviskoelastisk størrelse. (Christensen & Olsen, 1997) finder ved løsning af det koblede problem i én dimension, at man i en én-dimensional geometri måler, hvad man kan kalde en longitudinal varmekapacitet:

$$c_l = \frac{K_S + \frac{4}{3}G}{K_T + \frac{4}{3}G} c_V = \frac{M_S}{M_T} c_V, \quad (4)$$

hvor K_S er det adiabatiske bulkmodul og M_T og M_S kaldes henholdsvis det isoterme og adiabatiske longitudinale modul.

De fleste eksperimentelle situationer vil dog ikke kunne beskrives med en én-dimensional geometri. For en situation hvor der er ren diffusion vil en én-dimensional beskrivelse som sagt være god sålænge frekvenserne er 'høje nok'. Dette er dog ikke nødvendigvis tilfældet for det koblede problem. Det vil derfor være nyttigt at kunne finde et udtryk for den blandede termoviskoelastiske størrelse, der måles i en given eksperimental situation.

Det vil selvfølgelig være at foretrakke hvis man kan finde en analytisk løsning for sammenhængen mellem varmekapacitet og admittans. Den analytiske løsning er relativ nem at finde for ren diffusion i en dimension. Den analytiske løsning er stadig relativ overkommelig at finde for et én-dimensionalt koblet problem. Analytiske løsninger er imidlertid vanskeligere at finde for to og tre dimensionale problemer. Der findes matematiske teknikker til at finde generelle analytiske løsninger, for eksempel separation af ligningerne til ordinære differentialligninger og integration af en punktkildeløsning over det betragtede område (Carslaw & Jaeger, 1959), (Kupradze, 1979). Problemet er imidlertid at opnå en analytisk løsning for et givet randbetingelsesproblem, der afspejler et virkelig eksperiment. Den analytiske tilgangsvinkel kan altså i principippet bruges, men kan resultere i så komplicerede udtryk for Y som funktion af c at de alligevel må inverteres numerisk.

Jeg har derfor valgt at beskæftige mig med numeriske løsninger. I principippet skulle det fulde koblede problem løses for den betragtede eksperimentelle geometri. Dette kan man imidlertid forvente vil være kompliceret. Da jeg ikke er stødt på lignende eksempler på brug af numeriske metoder til databehandling indenfor dette område, har jeg valgt at betragte nogle simplere situationer. For det første undersøges det termiske randeffektpproblem og det koblede problem hver for sig. Dette giver mulighed for at sammenligne de to effekter i forhold til hinanden. Det termiske randeffektpproblem løses i en tre-dimensional geometri, hvor der endvidere tages højde for betydningen af det termiske respons af den brugte opstilling. Det koblede problem løses i en to-dimensional geometri, hvor der ikke tages højde for opstillingens respons.

Det er et overordnet formål med projektet at undersøge mulighederne for, og perspektiverne i, anvendelse af numeriske metoder til databehandling af resultater fra varmekapacitets-spektroskopi-eksperimenter.

Dette giver anledning til følgende mere specifikke problemformulering:

1.1 Problemformulering

Hvordan kommer de termiske randeffekter til udtryk i eksperimentet til måling af varmekapaciteten benyttet af Claus Behrens, Ph.D studerende ved IMFUFA, RUC? Eksperimentet vil blive præsenteret i kapitel 6.

Hvordan kan numeriske løsninger bruges til at tage højde for de termiske randeffekter i en tre-dimensonal geometri?

Det er desuden et formål at få formulert det koblede partielle differentiallignings-system dimensionsløst, på en måde der er velegnet til numerisk analyse. Herudfra undersøges følgende spørgsmål:

Kan man, udfra en numerisk løsning af det koblede problem i en to-dimensonal geometri, finde ud af, hvordan man i denne geometri skal tage højde for, at man mäter en blandet termoviskoelastisk responsfunktion?

1.2 Metode

Til at finde de numeriske løsninger har jeg valgt at benytte det kommersielle program FEMLAB®, version 2.3, der er et program til løsning af randværdiproblemer for partielle differentialligninger, ved hjælp af Finite Element Metoden. Grundideen i Finite Element Metoden er, kort fortalt, at opdele det betragtede domæne i trekant, det såkaldte gitter. Indenfor hver enkelt trekant approksimeres løsningen derefter med nogle basisfunktioner, for eksempel lineære funktioner, eller mere almindeligt med polynomier (såkaldte kvadratiske elementer). Disse elementer skal selvfølgelig antage de samme værdier på trekanternes rande og hjørner. På denne måde reduceres partielle differentialligninger til et sæt af algebraiske ligninger. Disse løses, hvis de da kan, i MATLAB®, version 6.5.

Fordelen ved numeriske løsninger frem for analytiske er som nævnt at man kan løse komplicerede randværdiproblemer. Der er imidlertid også nogle vanskeligheder, som det er nødvendigt at være opmærksom på. For at man kan bruge den numeriske løsning, må man sikre sig, at det faktisk er et fysisk realistisk problem, man løser, samt at den opnåede løsning har konvergeret og er pålidelig. Arbejdsprocessen kan minde om eksperimentelt arbejde og jeg har da også brugt en ikke uvæsentlig del af min tid på sådanne generelle undersøgelser, eftersom programmet var nyindkøbt da jeg startede mit projektarbejde. Herudover har jeg også haft brug for nogle mere specifikke undersøgelser.

Jeg har til løsning af det termiske randeffektproblem brug for at kunne modellere varmeudbredelse i en geometri bestående af forskellige materialer. Jeg har derfor undersøgt, hvordan programmet håndterer rande mellem forskellige domæner. Dels på en rand, hvor der varmes og hvor den samlede varmestrøm ud i de to domæner er kendt og dels på en rand, hvor varmen strømmer over og hvor der ikke må ske energiophobning.

Med hensyn til pålideligheden af den numeriske løsning har jeg sammenlignet numeriske løsninger med den analytiske løsning i en én-dimensional situation, hvor jeg kender den fulde analytiske løsning. Dette sandssynliggør, at jeg også kan stole på de numeriske løsninger i mere komplicerede situationer, hvor jeg ikke har analytiske udtryk at sammenligne med, sålænge den opnåede numeriske løsning bare har konvergeret.

1.3 Rapportens opbygning

Rapporten starter i kapitel 2 med en kort beskrivelse af relaksation i seje væsker og de komplekse frekvensafhængige responsfunktioner. Derefter kommer i kapitel 3 en kort introduktion til den metode, man bruger i specifik varmekapacitetspektroskopi. I kapitel 4 udledes de partielle differentialligninger, der beskriver den koblede termiske og mekaniske relaksation. Således er jeg nu klar til at kaste mig over de numeriske løsninger.

Først findes den numeriske løsning til det én-dimensionale termiske problem, med det formål at tjekke kvaliteten af de numeriske løsninger i en situation, hvor der kan sammenlignes med analytiske løsninger. Derefter behandles det fulde termiske randeffektproblem, for Claus Behrens' eksperiment. Alt dette sker i kapitel 5 og 6.

Endelig behandles det koblede problem i kapitel 7, først for en én-dimensional geometri og derefter for en to-dimensional geometri.

1.4 Angående vektor- og tensornotation

Jeg har brugt vektor- henholdsvis tensornotation omskifteligt igennem projektrapporten, således at jeg bruger den notation, som jeg i sammenhængen synes er mest hensigtsmæssig og forståelig.

2 Seje væsker

En dej væske kan kvalitativt beskrives som en væske, hvor dynamikken er bremset ned. Den dej væskes struktur er den samme som væskens, men molekylerne har sværere ved at omstrukturere sig i den dej væske. En dej væske udviser både faststof egenskaber og væske-egenskaber. Vi kan betragte et eksempel hvor temperaturen ændres ved et stepinput og derefter holdes konstant, samtidig med at trykket holdes konstant. Dette vil føre til en entropistigning, der kan deles op i to bidrag. En instantan stigning, der skyldes at systemets hurtige frihedsgrader, det vil sige molekylernes vibrationer omkring deres ligevægtspositioner, suger energi og en langsom, relakserende stigning, der skyldes molekylernes omstrukturering. Denne relakserende opførsel er karakteristisk for dej væsker; en dej væske kan ikke med det samme nå at tilpasse sig til påførte ændringer.

Relaksationen i en dej væske har altså, uanset om det drejer sig om for eksempel termisk, viskoelastisk eller dielektrisk relaksation, noget at gøre med hvor svært molekylerne har ved at omstrukturere sig. Som et mål for størrelsesordenen af relaksationstiderne bruger man ofte den såkaldte Maxwell-relaksationstid $\tau_m = \eta/G_\infty$, hvor η er viskositeten, der er et mål for hvor svært væsken har ved at flyde, og G_∞ er det instantane, elastiske shearmodul. G_∞ er omvendt proportional med temperaturen, men varierer ikke meget fra væske til glas ($G_\infty \approx 10^9 \text{ Pa}$), mens viskositeten er stærkt temperaturafhængig og afhænger eksponentielt af temperaturen¹. Temperaturafhængigheden af Maxwellrelaksationstiden er altså domineret af viskositetens temperaturafhængighed, og der gælder ca. $\tau_m = \eta \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$. (Harrison, 1976).

Om dej væsker opfører sig som et fast stof eller som en væske afhænger altså af hvor lange tider man betragter dem over i forhold til relaksationstiden. Ved en frekvensafhængig påvirkning vil den dej væske opføre sig som et fast stof hvis frekvensen $f \gg \tau^{-1}$ og som en væske hvis $f \ll \tau^{-1}$. Imellem disse to ekstremer findes det relakserende område.

I resten af rapporten vil jeg antage at vi befinner os i det lineære område, det vil sige at man kan nøjes med at betragte første ordens sammenhænge mellem de betragtede størrelser. Materialets respons på en given påvirkning kan altså beskrives indenfor rammerne af lineær responsteori. I det følgende vil jeg komme nærmere ind

¹Hvilken form denne temperaturafhængighed mere præcist har er stadigvæk et åbent spørgsmål. Der eksisterer flere alternative modeller, af hvilke kan nævnes entropimodellen (Adam & Gibbs, 1965), fri volumen modellen (Cohen & Turnbull, 1959) samt shoving modellen (Dyre et al., 1996). Dem vil jeg dog ikke komme nærmere ind på.

på hvordan man beskriver stoffer der relakserer. Først gives en generel introduktion i tidsbilledet, hvorefter det vises hvordan denne kan føres over i frekvensbilledet.

2.1 Lineær viskoelasticitetsteori

Lad os et øjeblik betragte hvordan et materiale vil reagere overfor et pludselig påført stress, for eksempel et mekanisk shearstress. Hvis et stof opfører sig elastisk vil det reagere instantan på en stresspåvirkning. Stoffet deformeres og vil herefter forblive i denne deformerede tilstand indtil stresset fjernes igen, hvorefter stoffet vender tilbage til den oprindelige udeformerede tilstand. Deformationstilstanden er altså kun afhængig af den øjeblikkelige stressstilstand. En elastisk deformation lagrer på denne måde mekanisk energi, der frigives igen uden nogen dissipation, når stress-påvirkningen ophører. Istedet for at påvirke materialet med et stress, kan man påføre et strain, hvorefter deformationen holdes konstant. Den konstitutive relation mellem stress og strain for et elastisk stof er i dette tilfælde:

$$\sigma_{ij} = G_{ijkl}\epsilon_{kl}, \quad (2.1.1)$$

hvor der er brugt Einsteinnotation, det vil sige der skal summeres over gentagne indices, i dette tilfælde k og l. σ_{ij} er stresstensoren, G_{ijkl} kaldes enten modulus-elasticitets- eller stivhedstensoren og indeholder de mekaniske responsfunktioner og ϵ_{kl} er strainstensoren. Disse vil blive præsenteret mere indgående i kapitel 4.

En Newtonsk viskøs væske vil ved en pludselig stresspåvirkning reagere med et støt flow, det vil sige vil fortsætte med at deformeres indtil stresset fjernes igen. Når stresset fjernes igen vil væsken ikke vende tilbage til sin udeformerede tilstand, men vil istedet forblive i den nye ligevægtstilstand. Den mekaniske energi der er blevet brugt til deformationen er gået tabt som varme på grund af friktionen i væsken. Hvor et elastisk stof kan lagre al den mekaniske energi vil en newtonsk væske altså dissipere al den mekaniske energi. Den konstitutive relation er denne gang mellem stress og strain-rate (det vil sige den tidslige ændring af strainstensen):

$$\sigma_{ij} = 2\eta\dot{\epsilon}_{ij} \quad \text{for } i \neq j, \quad (2.1.2)$$

hvor proportionalitetskonstanten er viskositeten.

Stoffer der både er i stand til at opslagre og dissipere mekanisk energi, som seje væsker, kan ikke beskrives som enten elastiske eller viskøse, men har fællestræk med begge. Sådanne stoffer kaldes viskoelastiske og skal beskrives indenfor rammerne af viskoelasticitetsteori. Udsættes et viskoelastisk materiale for en pludselig stresspåvirkning vil der være en instantan elastisk deformation efterfulgt af et lang-somt tidsafhængigt viskøst flow. Der vil altså være relaksation. Påføres nu en ny stresspåvirkning vil materialet reagere med en ny instantan deformation og en efterfølgende relaksation, mens relaksationen af det 'gamle' stress også vil fortsætte.

Det betyder altså at et viskoelastisk materiale har en hukommelse for alle tidligere påførte stressstilstande og den resulterende deformation kommer altså til at afhænge af hele stress-historien. Påføres omvendt et strain vil stresset relaksere, som funktion af tiden, for at tilpasse sig den nye deformationstilstand. Her vil det resulterende stress ligeledes være afhængig af hele strain-historien. I dette tilfælde bliver stress-strain relationen:

$$\sigma_{ij}(t) = \int_{-\infty}^t G_{ijkl}(t-t')\dot{\epsilon}_{kl}(t')dt', \quad (2.1.3)$$

hvor $G_{ijkl}(t)$ er de mekaniske relaksationsfunktioner. Ligning 2.1.3 er en generalisering af ligningerne 2.1.1 og 2.1.2 og indeholder disse som specialtilfælde. (Christensen, 1982)

2.2 Elasticitet-viskoelasticitet korrespondens

De termoviskoelastiske responsfunktioner bliver altså generelt tidsafhængige, og resultatet (outputtet) af en given påvirkning (input) skal findes som en foldning af den tidsafhængige responsfunktion med input. Dette gør vel livet meget mere besværligt for os? Jo selvfølgelig lidt mere besværligt, men ikke så meget som man umiddelbart skulle tro. Den lineære responsteori fortæller os nemlig, at hvis man transformerer til frekvensbilledet genvindes de oprindelige simple relationer.

Jeg betragter nu en helt generel situation, hvor der er givet et input ϕ , der varierer harmonisk med en frekvens ω , det vil sige

$$\phi(t) = \phi_\omega e^{-i\omega t}, \quad (2.2.1)$$

hvor ϕ_ω er den komplekse frekvensafhængige amplitude. Outputtet γ vil da også variere harmonisk med den samme frekvens, men med en fasedrejning i forhold til inputtet

$$\gamma(t) = \gamma_\omega e^{-i\omega t}, \quad (2.2.2)$$

hvor fasedrejningen er indeholdt i den komplekse amplitude. Her er det underforstået at de virkelige input og output er repræsenteret ved realdelene af disse udtryk. Hvis den tilhørende tidsafhængige responsfunktion kaldes $R(t)$ siger den lineære responsteori², at

$$\gamma(t) = \int_{-\infty}^t R(t-t')\dot{\phi}(t')dt' = \int_0^\infty R(t'')\dot{\phi}(t-t'')dt'', \quad (2.2.3)$$

²I denne formulering følges notationen brugt i (Christiansen, 1978)'s formulering af den lineære responsteori, som er almindelig brugt notation på IMFUFA. Dette er imidlertid ikke standard i alle sammenhænge. Man vil ofte se den alternative formulering

$$\gamma(t) = \int_{-\infty}^t R(t-t')\phi(t')dt',$$

hvor det er ϕ , der indgår og ikke den tidsafleddede af denne. Dette betyder at de frekvensafhængige responsfunktioner i denne notation skal defineres på en lidt anden måde.

hvor der efter andet lighedstegn er foretaget et variabelskift, $(t - t') = t''$. Vi kan nu indsætte udtrykkene for γ og φ :

$$\gamma_\omega e^{-i\omega t} = \int_0^\infty R(t'') \frac{\partial(\varphi_\omega e^{-i\omega(t-t'')})}{\partial(t-t'')} dt'' = -i\omega \varphi_\omega e^{-i\omega t} \int_0^\infty R(t'') e^{i\omega t''} dt''. \quad (2.2.4)$$

Da responsfunktionen $R(t) = 0$ for $t < 0$ på grund af kausaliteten (årsag skal komme før virkning) kan integralet vi endte med ovenfor uden at ændre på resultatet tages fra $t = -\infty$. Integralet kan dermed genkendes som den Fouriertransformerede af $R(t)$. Man definerer nu den frekvensafhængige responsfunktion $R(\omega)$ som $(-i\omega)$ gange den fouriertransformerede af tidsresponsfunktionen³: $R(\omega) = -i\omega F(R(t))$. Dermed kan relationen mellem de komplekse amplituder for input og output skrives:

$$\gamma_\omega = R(\omega)\varphi_\omega. \quad (2.2.5)$$

Hvis man går over til frekvensbilledet og benytter de frekvensafhængige komplekse responsfunktioner opnår man altså en simpel sammenhæng mellem input og output.

Dette gælder for alle former for lineært respons, og således også for de viskoelastiske responsfunktioner. Dette betyder at man kan løse viskoelastiske problemer på samme måde som elastiske problemer, ved at erstatte tidsafhængige input, output og responsfunktioner med de tilsvarende komplekse frekvensafhængige størrelser, det vil sige ved at udføre en fouriertransformation af det termoviskoelastiske problem. Dette kaldes af og til elasticitets-viskoelasticitets korrespondens princippet (Christensen, 1982)[s. 46]. Denne korrespondens gælder også mellem termoelastiske og termoviskoelastiske problemer (Christensen, 1982)[s. 89].

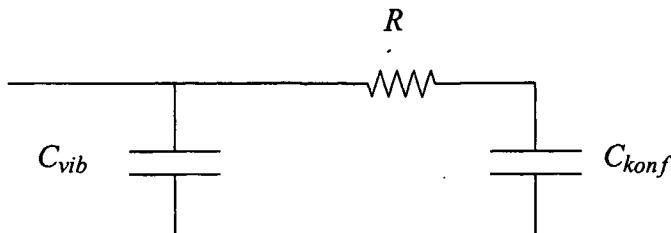
Alt dette vil jeg komme tilbage til i kapitel 4, hvor jeg vil udlede bevægelsesligningerne og varmeledningsligningen, der styrer det koblede termiske og viskoelastiske problem.

2.3 Debye-relaksation

Udseendet af relaksationsprocesserne i seje væsker er langtfra velbestemte. Den simpleste (ikke-trivielle) form for relaksationsproces man kan forestille sig er en, hvor der kun er én relaksationstid involveret. Dette kaldes en debye-proces (Harrison, 1976)[s. 174-175]. En sådan kan modelleres med et Voigt-element (en modstand i serie med en kapacitor) i parallel med en kapacitor, se figur 2.1.

Man kan lave en simpel model af den komplekse frekvensafhængige varmekapacitet som en debye-proces. Vi lader altså det elektriske netværk i figur 2.1 modellere den komplekse, frekvensafhængige specifikke varmekapacitet. Strengt taget kan

³I den førnævnte alternative formulering af den lineære responsteori vil $R(\omega)$ bare være defineret som den Fouriertransformerede af $R(t)$.



Figur 2.1 Et elektrisk netværk, der skal modellere en debye-proces. c_{vib} repræsenterer bidraget til varmekapaciteten fra de vibrationelle frihedsgrader, og modstanden R i serie med c_{konf} repræsenterer det relakserende bidrag fra de konfigurationelle frihedsgrader.

man nøjes med et Voigt-element for at modellere denne, den ekstra kapacitor definerer bare niveauet for varmekapaciteten.

Kapacitoren c_{vib} repræsenterer bidraget til varmekapaciteten fra de hurtige, vibrationelle frihedsgrader, og modstanden R i serie med c_{konf} repræsenterer det relakserende bidrag fra de langsomme, konfigurationelle frihedsgrader. Hvad bliver varmekapaciteten i denne model? Varmekapaciteten er en eftergivenhed, det vil sige forholdet imellem δS (en generaliseret ladning/forskydning) og en relativ temperaturændring $\delta T/T_0$ (en generaliseret spænding), hvor T_0 er en given referencetemperatur, jævnfør ligning 1. Man kan altså finde det frekvensafhængige udtryk for varmekapaciteten i modellen, ved at finde den frekvensafhængige eftergivenhed ($J(\omega)$) i det elektriske netværk.

Hvis man husker at parallelforbindelser har samme spænding og serieforbindelser samme strøm, og at integration med hensyn til tiden i frekvensbilledet svarer til at dividere med $(-i\omega)$ fås:

$$c(\omega) = c_{vib} + \frac{1}{\frac{1}{c_{konf}} - i\omega R} = c_{vib} + \frac{c_{konf}}{1 - i\omega\tau_D}, \quad (2.3.1)$$

hvor $\tau_D = R c_{konf}$ er en karakteristisk relaksationstid for systemet. τ_D^{-1} vil da være en karakteristisk frekvens for systemet og i de to grænser hvor ω er meget lille henholdsvis meget stor iforhold til denne fås

$$\begin{aligned} c &= c_{vib} + c_{konf} && \text{for } \omega\tau_D \ll 1 \\ c &= c_{vib} && \text{for } \omega\tau_D \gg 1. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Varmekapaciteten c kan enten være c_v , c_p eller en helt tredje afhængig af situationen.

Denne model for varmekapaciteten vil jeg komme tilbage til senere, i forbindelse med vurderingen af den numeriske løsning af det termiske randeffektproblem i kapitel 6.

3 Måling af frekvensafhængig varmekapacitet

Dette projekt tager som nævnt udgangspunkt i en bestemt metode til måling af den frekvensafhængige specifikke varmekapacitet; denne metode kan kaldes varmekapacitets-spektroskopi. Jeg vil her give en kort beskrivelse af metoden.

I et varmekapacitets-spektroskopi-eksperiment måles den termiske admittans af en væske ved at nedsænke en plade, der virker både som varmekilde og termometer i væsken. I praksis er varmepladen ofte en tynd film, med en temperaturafhængig modstand, der sidder på et substrat af en slags, for eksempel glas.

En harmonisk oscillérende strøm sendes gennem filmen, det vil sige

$$I(t) = I_0 \cos(\omega t) = re(I_0 e^{-i\omega t}), \quad (1)$$

hvorved den effekt, der afsættes i filmen, også varierer harmonisk, dog med den dobbelte frekvens:

$$P(t) = R(t) I(t)^2 \approx \frac{1}{2} I_0^2 R_0 (1 + re(e^{-i2\omega t})). \quad (2)$$

I udregningen af denne effekt er der set bort fra at modstanden er temperaturafhængig, men da middelværdien af modstanden R_0 er meget større end udsvingene fra denne middelværdi er fejlen man begår ved at se bort fra temperaturafhængigheden i udregningen af effekten ikke ret stor.

Som det ses har den afsatte effekt både en DC- og en AC-komponent. DC-leddet giver anledning til en tidsuafhængig temperaturstigning i prøven, som man skal tage højde for ved bestemmelse af den absolutte temperatur af varmepladen (Birge et al., 1997). AC-leddet giver en varmestrøm, der oscillerer med frekvensen 2ω :

$$j_Q(t) = \frac{1}{2} I_0^2 R_0 re(e^{-i2\omega t}) = re(j_{Q,2\omega} e^{-i2\omega t}). \quad (3)$$

Denne varmestrøm giver anledning til en temperatur-oscillation af pladen med den samme frekvens, men med en fasedrejning ϕ i forhold til varmen

$$\Delta T(t) = re(T_{2\omega} e^{-i2\omega t}), \quad (4)$$

hvor $T_{2\omega} = T_A e^{i\phi}$ er den komplekse amplitude, der altså også indeholder fasen. Fremover vil alle symboler med fodtegn ω betegne komplekse amplituder. Den

termiske admittans er den komplekse frekvensafhængige responsfunktion, der er givet som forholdet mellem varmestrømmens (en generaliseret strøm) og temperatuurens (en generaliseret spænding) komplekse amplituder:

$$Y(\omega) = \frac{jQ,2\omega}{T_{2\omega}}. \quad (5)$$

På denne måde måles den termiske admittans af væsken, ved at måle temperaturoscillationernes komplekse amplitude på varmepladen.

Filmen er som sagt lavet af et materiale med en temperaturafhængig modstand, hvilket betyder at temperaturen kan måles ved hjælp af den såkaldte 3ω -metode. Modstanden vil oscillere med samme frekvens og fasedrejning i forhold til strømmen som temperaturen, det vil sige med frekvensen 2ω og fasedrejning φ . Altså er den tidsafhængige modstand af filmen til første orden givet ved:

$$R(t) = R_0(1 + \alpha\Delta T) = R_0(1 + \alpha re(T_{2\omega}e^{-i2\omega t})), \quad (6)$$

hvor $\alpha = \frac{1}{R} \frac{dR}{dT}$ angiver modstandens temperaturafhængighed. Spændingen over filmen bliver altså

$$\begin{aligned} V(t) &= R(t)I(t) = R_0(1 + \alpha re(T_{2\omega}e^{-i2\omega t}))I_0 re(e^{-i\omega t}) \\ &= R_0 I_0 (1 + \alpha \frac{1}{2}(T_{2\omega}e^{-i2\omega t} + T_{2\omega}^* e^{i2\omega t})) \frac{1}{2}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \\ &= R_0 I_0 re(e^{-i\omega t}) + \frac{1}{2} I_0 R_0 \alpha (re(T_{2\omega}e^{-i3\omega t}) + re(T_{2\omega}e^{-i\omega t})). \end{aligned} \quad (7)$$

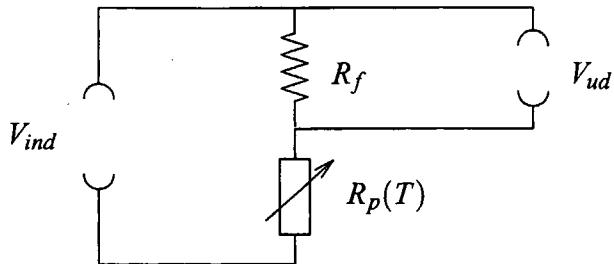
Det andet led i dette udtryk ses at oscillere med tre gange frekvensen af inputstrømmen, og kaldes derfor den tredje harmoniske af spændingsoutputtet (det er den tredje fourier-koefficient af spændingen). Den tredje harmoniske kan i en måling isoleres fra det samlede spændingsoutput, og gennem kendskabet til amplituden og fasedrejningen af den tredje harmoniske kan den komplekse temperaturamplitude altså findes.

Denne præsentation er ikke så praktisk anvendelig. I virkeligheden er det ikke strømmen gennem varmepladen man styrer, men spændingen over varmepladen og en formodstand. Et netværk for denne situation er vist i figur 3.1 Det er altså V_{ind} man styrer. Et udtryk for V_{ud} findes ved at udnytte at strømmen gennem formodstanden R_f er den samme som strømmen gennem varmepladen R_p , det vil sige at forholdet mellem spændingerne V_{ud} og V_{ind} er det samme som forholdet mellem R_f og $(R_f + R_p)$:

$$V_{ud} = \frac{R_f}{R_f + R_p} V_{ind}. \quad (8)$$

Den afsatte effekt i varmepladen findes som

$$P = \frac{(V_{ind} - V_{ud})^2}{R_{pm}}, \quad (9)$$



Figur 3.1 Figuren viser det netværk man måler over. V_{ind} er inputspændingen, som man styrer. V_{ud} er outputspændingen, der måles over formodstanden. $R_p(T)$ betegner den temperaturafhængige modstand af filmen, mens R_f betegner formodstanden.

hvor R_{pm} er den gennemsnitlige værdi af den temperaturafhængige modstand R_p .

Ved at indsætte ligning 6 i ligning 8 på R_p 's plads kan man ved udregning få, at den termiske varmestrøm og dermed også ΔT af pladen varierer med 2ω og at en del af V_{ud} varierer med 3ω . Dette kan som før udnyttes til at finde den termiske admittans, ved at måle den tredje harmoniske af V_{ud} . (Behrens, 2002)

Fremover vil jeg betragte en varmestrøm, der oscillerer med frekvensen ω i stedet for 2ω . Dermed er

$$Y(\omega) = \frac{jQ_0\omega}{T_\omega}, \quad jQ(t) = \frac{1}{2}I_0^2R_0 \operatorname{re}(e^{-i\omega t}) = \operatorname{re}(jQ_0 2\omega e^{-i2\omega t}), \quad \Delta T(t) = \operatorname{re}(T_\omega e^{-i\omega t}). \quad (10)$$

3ω -metoden kan benyttes i forskellige eksperimentelle situationer. Hos for eksempel (Birge et al., 1997) og (Menon, 1996) måles den termiske admittans ved at nedsænke en varmeplade helt i væsken, mens Claus Behrens (Ph.D studerende, IMFUFA, RUC) benytter en opstilling, hvor et glasrør med væsken i, placeres over varmepladen. Det er denne opstilling jeg vil undersøge i kapitel 6. (Christensen & Olsen, 1998) benytter en (omtrent) kugleformet modstand som varmekilde, hvorpå en væskedråbe placeres. I disse eksperimenter måles typisk i frekvensområdet mHz-kHz. Det er den samme metode der benyttes i disse forskellige opstillinger, men eksperimentets geometri har en betydning for det teoretiske udtryk, der kobler den målte termiske admittans til varmekapaciteten.

Problemet er altså, at finde et teoretisk udtryk for den termiske admittans, der kobler den målte admittans i et givet eksperiment til den størrelse man ønsker at finde, nemlig varmekapaciteten. Varmestrømmen ind i væsken styres gennem strøminputtet til varmefilmen, det vil sige vi har brug for et teoretisk udtryk for den komplekse temperaturamplitude ved varmepladen.

Temperatur-amplituden og -fasedrejningen vil afhænge af eksperimentets geometri, samt af de termiske egenskaber (varmekapacitet og varmeledningsevne) af substratet og den væske man måler på. Når man måler på seje væsken vil temperaturen desuden også afhænge af de mekaniske egenskaber af væsken, idet der

opstår stress, der på grund af væskens høje viskositet relakserer så langsomt at de termisk inducerede deformationer igen giver anledning til en temperaturændring. Temperaturens afhængighed af de mekaniske egenskaber samt af eksperimentets geometri er de to problemer der ønskes belyst i dette projekt.

4 De termomekaniske ligninger

I dette kapitel udledes de differentialligninger der bestemmer den termiske og mekaniske relaksation af en dej væske, nemlig bevægelsesligningerne og diffusionsligningen. Afsnittet bygger generelt på (Feynmann et al., 1964), (Nowacki, 1986), (Landau & Lifshitz, 1986) og (Christensen, 1982).

Jeg vil udlede differentialligningerne for det termoelastiske tilfælde, hvorefter de oversættes til termoviskoelastiske ligninger ved hjælp af elasticitetsviskoelasticitets korrespondensen.

Undervejs benyttes Einsteinnotation, det vil sige i ethvert udtryk, der indeholder gentagne indices er det underforstået at der skal summeres over disse, medmindre andet eksplisit nævnes.

4.1 Stress

Med stress menes de indre spændinger i et legeme. I et kontinuum er stresset i ethvert punkt beskrevet ved tensorfeltet $\underline{\underline{\sigma}}(\mathbf{x}, t)$ ¹, hvor σ_{ij} er spændingens komposant i retningen \mathbf{e}_i på planen med normalvektor \mathbf{e}_j . Spændingen \mathbf{s} på et lille arealelement $d\mathbf{a}$ er da givet ved

$$\mathbf{s} = \underline{\underline{\sigma}} d\mathbf{a}. \quad (4.1.1)$$

At denne relation gælder uanset hvilken retning normalvektoren til planen har, og at $\underline{\underline{\sigma}}$ dermed faktisk beskriver stresset i ethvert punkt, vises ved at den samlede kraft på en infinitesimal tetraede skal være 0. Det viser sig at stress-tensoren er symmetrisk, det vil sige at $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$. Dermed er der højest 6 uafhængige komponenter i $\underline{\underline{\sigma}}$.

Tensorens diagonalelementer beskriver spændinger, der er normale til de betragtede overflader, således er det hydrostatiske tryk p defineret som

$$-\Delta p = \frac{1}{3}\sigma_{kk} = \frac{1}{3}tr(\underline{\underline{\sigma}}). \quad (4.1.2)$$

Off-diagonalelementerne beskriver tangentialspændinger, også kaldet shearspændinger. Disse skrives af og til i den *deviatoriske* stresstensor s_{ij}

$$s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{kk} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}tr(\underline{\underline{\sigma}}) = \sigma_{ij} + p\delta_{ij}, \quad (4.1.3)$$

der har spor 0.

¹Fremover vil jeg for at lette notationen lade det være underforstået at $\underline{\underline{\sigma}}$ er tids- og stedafhængig.

4.2 Strain

Strainet er et udtryk for deformationen af et legeme. Lad os kigge på en lille forskydning i dette legeme. Enhver forskydning kan opdeles i en translation, en rotation og en deformation (Christensen, n.d.). Forskydningsfeltet $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ angiver hvor meget punktet med stedvektoren \mathbf{x} flytter sig ved forskydningen, det vil sige forskydningen bringer punktet over i

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}). \quad (4.2.1)$$

Vi betragter en lille pil $\mathbf{l} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$, der ved en forskydning sendes over i $\mathbf{l}' = \mathbf{x}' - \mathbf{x}'_0$. Vi har

$$\mathbf{l}' = \mathbf{x} + \mathbf{u}(\mathbf{x}) - (\mathbf{x}_0 + \mathbf{u}(\mathbf{x}_0)) = \mathbf{l} + \mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_0), \quad (4.2.2)$$

der ved rækkeudvikling af $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ til første orden omkring \mathbf{x}_0 bliver²

$$\mathbf{l}' = \mathbf{l} + \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{l} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{l}, \quad (4.2.3)$$

hvor $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$ er en tensor. Hvis forskydningen er en ren translation er $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = 0$, det vil sige tensoren $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$ beskriver rotationen og deformationen af legemet ved forskydningen \mathbf{u} . $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ deles op i en symmetrisk og en antisymmetrisk del:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.2.4)$$

og det kan vises at det første led beskriver rotationen og det andet led deformationen af legemet (Christensen, n.d.). Vi kan altså definere strainstensoren ε_{ij} , der beskriver deformationen af legemet

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.2.5)$$

Som med stressstensoren deles strainstensoren også af og til op i sporet og en deviatorisk strainstensor, der har spor 0. Om sporet gælder

$$\varepsilon_{kk} = \nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\Delta V}{V}. \quad (4.2.6)$$

Den deviatoriske strainstensor defineres

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk}. \quad (4.2.7)$$

²Fremover vil stedafhængigheden af forskydningsfeltet være underforstået, ligesom også tidsafhængigheden er det.

4.3 Bevægelsesligningerne for et termoelastisk system

For at kunne finde bevægelsesligningerne er det nødvendigt at opskrive et udtryk for den samlede kraft, der virker på et givent legeme. Den samlede kraft er givet ved summen af overfladekræfter, som for eksempel stress, og volumenkræfter, som for eksempel tyngdekraften og elektromagnetiske kræfter. Vi vil dog se bort fra tyngdekraften og andre eventuelle volumenkræfter. For at opnå den samlede kraft på hele det betragtede legeme skal stresset integreres over hele overfladen:

$$F_i = \oint_S \sigma_{ij} ds_j. \quad (4.3.1)$$

Ved hjælp af Gauss' teorem kan overfladeintegralet laves om til et volumenintegral, idet

$$F_i = \oint_S \sigma_{ij} ds_j = \int_V \nabla_j \sigma_{ij} dv. \quad (4.3.2)$$

Specielt for et lille volumen må der gælde at

$$dF_i = \nabla_j \sigma_{ij} dv. \quad (4.3.3)$$

Det viser sig altså at kraften per volumen i et punkt er givet ved divergensen af stresstensoren. Newtons 2. lov får nu følgende udseende for et lille volumen dv , med massen dm

$$dF_i = dm a_i = \nabla_j \sigma_{ij} dv \Leftrightarrow \rho a_i = \nabla_j \sigma_{ij} \Leftrightarrow \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \nabla_j \sigma_{ij}, \quad (4.3.4)$$

hvor ρ er masseylden, a_i er den i 'te komposant af accelerationen af det lille volumenelement dv og u_i er den i 'te komposant af forskydningsfeltet.

Det der nu mangler er en sammenhæng mellem stresstensoren σ_{ij} og henholdsvis forskydningsfeltet \mathbf{u} og temperaturen T . Fra den lineære elasticitetsteori kendes sammenhængen mellem stress og strain (jævnfør kapitel 2.1):

$$\sigma_{ij} = G_{ijkl} \epsilon_{kl}, \quad (4.3.5)$$

hvor der summeres over gentagne indices. Da vi nu ved at stress- og straintensorerne er symmetriske og der derfor højst er 6 uafhængige koefficienter i disse, er der højst 36 (ud af 81) uafhængige koefficienter i G_{ijkl} . For et isotropt materiale (som en væske jo er) viser det sig imidlertid at der gælder en simplere sammenhæng, idet der i dette tilfælde kun er to uafhængige koefficienter i elasticitetstensoren.

I et isotropt materiale vil stress- og straintensorerne være diagonaliserede i samme koordinatsystem. Da alle off-diagonalelementerne altså er 0 i de to tensorer bliver

4.3.5

$$\sigma_{ii} = G_{iiii} \epsilon_{ii} + G_{iijj} \epsilon_{jj} + G_{iikk} \epsilon_{kk}, \quad (4.3.6)$$

hvor der ikke er benyttet Einsteinnotation, det vil sige ovenstående sammenhæng gælder for den (ii)'te komponent i stresstensoren (Christensen, n.d.). Dette giver

altså 9 koefficienter i elasticitetstensoren, men da der jo ikke er nogen foretrukken retning i et isotrop materiale, må udtrykket være symmetrisk i x , y og z . Det vil sige at

$$G_{xxx} = G_{yyy} = G_{zzz} = A,$$

hvor A er en eller anden konstant, og alle de blandede koefficienter G_{ijij} er lig en anden konstant B for $i, j = x, y, z$. Der er altså kun 2 uafhængige elementer i G_{ijkl} , dem vil vi nu gerne bestemme. Vi kan kigge på en tredjedel gange sporet af stresstensoren. Ved at bruge ligning 4.3.6 og indsætte A og B fås

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) &= \frac{1}{3} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) = \frac{1}{3} (A + 2B)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ &= \frac{1}{3} (A + 2B) \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}). \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

Ved at benytte ligning 4.3.7, 4.2.6 og 4.1.2 ses at

$$\Delta p = -\frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) = -\frac{1}{3} (A + 2B) \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) = -\frac{1}{3} (A + 2B) \frac{\Delta V}{V}, \quad (4.3.8)$$

det vil sige der må gælde

$$\frac{1}{3} (A + 2B) = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T = K_T, \quad (4.3.9)$$

hvor K_T er det isoterme bulkmodul. Bulkmodulet har altså noget at gøre med de volumenændrende deformationer. Deformationer der ændrer formen, men ikke volumenet har noget med shearmodulet (G) at gøre, idet shearmodulet angiver proportionaliteten mellem afvigelse fra middeltrækket (et negativt tryk) og afvigelse fra middel-volumenændringen (Christensen, n.d.). Lad os derfor kigge på xx -koordinaten i den deviatoriske stresstensor $s_{xx} = \sigma_{xx} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}})$. Ved brug af ligning 4.3.6 og 4.3.7 fås

$$\begin{aligned} s_{xx} = \sigma_{xx} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) &= A\varepsilon_{xx} + B(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{1}{3} (A + 2B) \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \\ &= (A - B)\varepsilon_{xx} + B \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) - \frac{1}{3} (A + 2B) \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

$$= (A - B)(\varepsilon_{xx} - \frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}})). \quad (4.3.11)$$

Det viser sig at være smart at definere G som $\frac{1}{2}(A - B)$, således at man får

$$s_{xx} = 2Ge_{xx}, \quad (4.3.12)$$

hvor s_{xx} og e_{xx} er koordinater i den deviatoriske stress- henholdsvis straintensor. Da materialet er isotrop må den samme sammenhæng selvfølgelig gøre sig gældende for s_{yy} og s_{zz} , hvilket vil sige at der for den deviatoriske stresstensor gælder

$$\underline{\underline{s}} = 2G\underline{\underline{\varepsilon}} \quad (4.3.13)$$

og for sporet

$$\frac{1}{3}\sigma_{ii} = K_T \epsilon_{ii} \quad \text{eller} \quad \frac{1}{3}tr(\underline{\sigma}) = K_T tr(\underline{\epsilon}), \quad (4.3.14)$$

hvor man skal være opmærksom på at der nu igen benyttes Einstein-notation.

Da G er en konstant og derfor ikke ændres ved skift af koordinatsystem gælder sammenhængen i ligning 4.3.13 generelt og ikke kun i koordinatsystemer hvor stress- og strain-tensoren er diagonaliserede. Ligning 4.3.14 gælder ligeledes generelt, idet sporet af en tensor er invariant overfor koordinattransformationer.

Ligningerne 4.3.13 og 4.3.14 kan samlet skrives

$$\sigma_{ij} = K_T \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2G(\epsilon_{ij} - \frac{1}{3} \epsilon_{kk} \delta_{ij}) \quad (4.3.15)$$

Dette er Hookes lov for et isotropt kontinuert medium. Men i denne sammenhæng er der ikke taget højde for temperaturændringerens indflydelse på stresset. For små temperaturændringer $|\frac{\Delta T}{T_0}| \ll 1$ antages trykket at afhænge lineært af temperaturen (Feynmann et al., 1964), det vil sige der kommer et ekstra led i ligning 4.3.14

$$-\Delta p = \frac{1}{3}\sigma_{ii} = K_T \epsilon_{ii} - \beta_V T, \quad (4.3.16)$$

hvor $\beta_V = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V$ er den isokore trykstignings-koefficient og der med T her menes de små afvigelser (ΔT) fra middeltemperaturen T_0 .

Alt i alt får vi følgende sammenhæng mellem stress, strain og temperatur

$$\sigma_{ij} = K_T \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2G(\epsilon_{ij} - \frac{1}{3} \epsilon_{kk} \delta_{ij}) - \beta_V T \delta_{ij}, \quad (4.3.17)$$

hvilket kaldes Duhamel-Neumann relationen. (Feynmann et al., 1964)[39-6] og (Nowacki, 1986)[s. 1-9]

Indsættes 4.3.17 i 4.3.4 og bruges definitionen 4.2.5 fås bevægelsesligningerne for systemet:

$$G \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \left(\frac{1}{3} G + K_T \right) \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} - \beta_V \frac{\partial T}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (4.3.18)$$

Her skal man igen huske at der summeres over gentagne indices, det vil sige i dette tilfælde j . Ligning 4.3.18 repræsenterer altså en bevægelsesligning for hver af retningerne $i = x, y, z$. Dette skrives i vektornotation:

$$G \nabla \cdot \nabla \mathbf{u} + \left(\frac{1}{3} G + K_T \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) - \beta_V \nabla T = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}. \quad (4.3.19)$$

4.4 Diffusionsligningen

Diffusionsligningen bygger på kontinuitetsligningen for mængden af entropi i systemet samt Fouriers lov, der er en konstitutiv ligning for sammenhængen mellem temperatur og varmestrøm. Diffusionsligningen udledes først termoelastisk, hvorefter den transformeres til den termoviskoelastiske ligning.

Kontinuitetsligningen angiver at der for volumenelementet dv skal gælde

$$\dot{\Delta S} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_S dv + \sigma_S dv, \quad (4.4.1)$$

hvor $\dot{\Delta S}$ betegner ændringen af systemets entropi pr. tid, $\nabla \cdot \mathbf{j}_S dv$ er entropistrømmen ud af volumenelementet dv og $\sigma_S dv$ er entropiproduktionen i volumenet pr. tid. Lad os nu forestille os vi udfører en kredsproces på systemet. For denne ved vi at der skal gælde $\dot{\Delta S} = 0$, idet entropien er en tilstandsfunktion, men ellers kan vi ikke vide noget om hverken systemets entropi eller entropiproduktionen. Derimod kan vi holde styr på den entropi, der skal tilføres eller fjernes fra systemet under kredsprocessen og på denne måde finde entropiproduktionen. Lad os derfor betragte entropistrømmen ud af systemet.

Vi kan forestille os at omgivelserne i principippet kan fjerne entropistrømmen $\nabla \cdot \mathbf{j}_S dv$ på en reversibel måde. For reversible processer gælder

$$\dot{\Delta S} = \frac{\Delta Q}{T(t)} \Rightarrow \nabla \cdot \mathbf{j}_S dv = \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_Q dv}{T(t)}. \quad (4.4.2)$$

Nu er temperaturen jo ikke konstant, men varierer omkring en middeltemperatur T_0 , det vil sige $T(t) = T_0 + \Delta T$. Dette giver:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_S dv = \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_Q dv}{T_0 + \Delta T} = \frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_Q dv}{T_0(1 + \frac{\Delta T}{T_0})} = \frac{1}{T_0}(\nabla \cdot \mathbf{j}_Q dv) - \frac{\Delta T}{T_0^2}(\nabla \cdot \mathbf{j}_Q dv), \quad (4.4.3)$$

hvor det sidste lighedstegn fremkommer ved en rækkeudvikling i $\frac{\Delta T}{T_0}$. Det første led beskriver varmeudvekslingen med omgivelserne ved temperaturen T_0 og må derfor være 0 ved en kredsproces. Det andet led må dermed beskrive systemets entropiproduktion i kredsprocessen (Christensen, 1989). Denne entropiproduktion kan vi imidlertid se bort fra, da det er en andenordenseffekt, idet vi befinner os i det lineære regime, hvor $\frac{\Delta T}{T_0} \ll 1$.

Man kan altså skrive kontinuitetsligningen (ligning 4.4.1)

$$\dot{\Delta S} = -\frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_Q dv}{T_0}. \quad (4.4.4)$$

For systemets samlede volumen V fås altså

$$\frac{\dot{\Delta S}}{V} = -\frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_Q}{T_0}. \quad (4.4.5)$$

Nu findes venstresiden af 4.4.5 via entropidifferentialet:

$$\frac{\Delta S}{V} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \Delta T + \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T \frac{\Delta V}{V} = \frac{c_V}{T_0} \Delta T + \beta_V \frac{\Delta V}{V}, \quad (4.4.6)$$

hvor c_V er den volumenspecifikke isokore varmekapacitet $c_V = \frac{T_0}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V$ og $\beta_V = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T$ er den isokore trykstigningskoefficient.

Den relative volumenændring $\frac{\Delta V}{V}$ er, som vi ved fra ligning 4.2.6, lig med divergensen af forskydningsfeltet \mathbf{u} . Denne sammenhæng samt udtrykket for $\frac{\Delta S}{V}$ indsættes nu i ligning 4.4.5, hvilket giver

$$c_V \frac{\partial T}{\partial t} + \beta_V T_0 \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_Q. \quad (4.4.7)$$

Nu er vi næsten fremme. Det sidste vi skal have styr på i denne ligning er ledet $\nabla \cdot \mathbf{j}_Q$. Sammenhængen mellem varmestrømmen j_Q og temperaturen T er givet ved Fouriers lov, der siger at varmestrømmen er proportional med den negative gradient af temperaturen

$$j_Q = -\lambda \nabla T,$$

hvor λ er varmeledningsevnen. Gradienten giver jo netop den retning hvor temperaturen vokser mest, det vil sige varmen strømmer i den modsatte retning. Fouriers lov indsættes i ligning 4.4.7, hvilket endelig resulterer i diffusionsligningen for et termoelastisk legeme:

$$c_V \frac{\partial T}{\partial t} + \beta_V T_0 \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \lambda \nabla \cdot \nabla T, \quad (4.4.8)$$

hvor man skal huske at T her, som i ligning 4.3.19, betegner afvigelsen i forhold til referencetemperaturen T_0 .

Det er de koblede partielle differentialligninger 4.3.19 og 4.4.8 der beskriver det termomekaniske respons i et elastisk legeme. Med givne randbetingelser på \mathbf{u} og T kan $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ og $T(\mathbf{x}, t)$ altså findes ved løsning af disse ligninger.

4.5 Termoviskoelasticitet

Ovenstående ligninger gælder som sagt for et termoelastisk legeme, hvor responsfunktionerne er konstante og ikke afhænger af tiden. Som beskrevet i kapitel 2 kan man imidlertid ved hjælp af elasticitets-viskoelasticitets korrespondensen opnå de tilsvarende termoviskoelastiske ligninger ved at erstatter de konstante termoelastiske responsfunktioner med de tilsvarende komplekse, frekvensafhængige viskoelastiske responsfunktioner.

Hvis vi antager at \mathbf{u} og T varierer harmonisk, det vil sige $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_\omega(\mathbf{x})e^{-i\omega t}$ og $T(\mathbf{x}, t) = T_\omega(\mathbf{x})e^{-i\omega t}$ fås diffusionsligningen for et termoviskoelastisk legeme:

$$-i\omega c_V T_\omega - i\omega \beta_V T_0 (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) = \lambda \nabla \cdot \nabla T_\omega. \quad (4.5.1)$$

Og bevægelsesligningerne for et termoviskoelastisk legeme:

$$\begin{aligned} G \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega + \left(\frac{1}{3}G + K_T \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) - \beta_V \nabla T_\omega \\ = -\rho \omega^2 \mathbf{u}_\omega, \end{aligned} \quad (4.5.2)$$

hvor \mathbf{u}_ω er den komplekse amplitude af forskydningsfeltet og T_ω er den komplekse amplitude af temperaturvariationen. Det er her og fremover underforstået at alle de indgående responsfunktioner i principippet er komplekse og frekvensafhængige.

Man kan forsimple ligningssystemet ved at sætte det inertielle led $\rho \omega^2 \mathbf{u}_\omega$ lig 0. Dette er en god antagelse så længe lydens bølgelængde er meget længere end den betragtede geometri. Lydhastigheden i en væske er omkring 1000-2000 m/s (Lide, 1999-2000), det vil sige ved en frekvens på 1kHz vil lydens bølgelængde være i størrelsesordenen meter, og dermed betragteligt længere end størrelserne i de relavante opstillinger, der typisk højst vil være af størrelsesordenen cm.

Når vi fremover refererer til bevægelsesligningerne for et termoviskoelastisk legeme menes der derfor ligningerne:

$$G \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega + \left(\frac{1}{3}G + K_T \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) = \beta_V \nabla T_\omega. \quad (4.5.3)$$

4.6 Opsamling

4.6.1 Ligningerne for det koblede problem

Det er de koblede partielle differentialligninger (ligning 4.5.3 og 4.5.1) der styrer det termiske og mekaniske respons i en sej væske. Det er altså disse ligninger der skal løses i en given geometri og med givne randbetingelser på \mathbf{u}_ω og T_ω for det, som jeg har kaldt det koblede problem.

4.6.2 Ligningerne for det rent termiske randeffektproblem

Det er nødvendigt at skelne mellem hvad der gælder for faste stoffer og hvad der gælder for væsker.

Væske

For en tyndtflydende væske gælder $G \approx 0$, idet det næsten ikke koster noget energi at deformere en væske på en måde der ikke ændrer volumenet, dvs. at få den til at flyde. For en tyndtflydende væske giver det mening at tale om at man kan have varmeudbredelse under isobare betingelser. Dermed kan ligning 4.4.6 skrives som $\frac{\Delta S}{V} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \cdot \Delta T = \frac{c_p}{T_0} \Delta T$, hvor c_p er den volumenspecifikke isobare varmekapacitet $c_p = \frac{T_0}{V} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p$. Dermed reduceres diffusionsligningen (ligning 4.5.1) til:

$$-i\omega c_p T_\omega = \lambda \nabla \cdot \nabla T_\omega, \quad (4.6.1)$$

som jeg har kaldt den 'almindelige' diffusionsligning.

Ligning 4.3.16 fortæller os at der under isobare betingelser endvidere gælder at $K_T(\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) = \beta_V T_\omega$, hvilket betyder at de mekaniske ligninger i dette tilfælde reducerer til

$$\nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega = -\frac{1}{3} \frac{\beta_V}{K_T} \nabla T_\omega = -\frac{1}{3} \alpha_p \nabla T_\omega, \quad (4.6.2)$$

hvor $\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p$ er den isobare varmeudvidelseskoefficient. Dette fortæller altså at den termiske ligning, diffusionsligningen, er afkoblet fra de mekaniske ligninger. De mekaniske ligninger er stadigvæk koblet til temperaturvariationerne, hvad man også ville forvente, eftersom væsken må udvide sig når den opvarmes. Den mekaniske (vektor)-ligning er nu blevet til en Poisson-ligning med kildeled $-\frac{1}{3} \alpha_p \nabla T_\omega$, altså er temperaturgradienten en kilde til deformationer i væsken.

Fast stof

For et fast stof gælder $G > 0$, derimod gælder $\alpha_p \approx 0$, idet volumenet af et fast stof ikke ændrer sig nævneværdigt ved ændring af temperaturen. For faste stoffer giver det også mening at tale om at man kan have varmeudbredelse under isobare betingelser. Dermed reduceres diffusionsligningen (ligning 4.5.1) som ovenfor til:

$$-i\omega c_p T_\omega = \lambda \nabla \cdot \nabla T_\omega. \quad (4.6.3)$$

Siden $\alpha_p \approx 0$ reduceres de mekaniske ligninger i dette tilfælde til Laplace-ligningen:

$$\nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega = 0. \quad (4.6.4)$$

Det vil sige at diffusionsligningen og de mekaniske ligninger er helt dekoblede for faste stoffer.

Der er altså to situationer hvor det termiske respons ikke er koblet til det mekaniske respons, og det derfor er meningsfyldt at tale om det rent termiske randeffektproblem, nemlig for tyndtflydende væsker og for faste stoffer. I disse tilfælde reduceres problemet dermed til et rent termisk problem. Det er ligning 4.6.1, der løses for det termiske randeffektproblem.

5 Det termiske problem i en dimension

I dette kapitel løser jeg først den én-dimensionale almindelige diffusionsligning analytisk med henholdsvis isoterme og adiabatiske randbetingelser, hvorved jeg kan finde analytiske udtryk for den termiske admittans i disse to situationer. Der ses altså bort fra koblingen til de mekaniske egenskaber. Endvidere kigger jeg på det tilfælde hvor der er varmediffusion ud i to forskellige materialer, fra en varmekilde i midten. Dette har jeg brug for når jeg skal undersøge de termiske randefektproblemer, der opstår på grund af det substrat filmen sidder på. Herefter løser jeg diffusionsligningen numerisk for et todelt domæne, med forskellige materialeegenskaber. Den opnåede numeriske løsning sammenlignes med den analytiske.

Dette gøres dels for at illustrere Femlabs måde at håndtere randbetingelser mellem domæner med forskellige egenskaber på. Dels for at kunne vurdere kvaliteten af den numeriske løsning i et relativt simpelt tilfælde, hvor der findes en analytisk løsning at sammenligne med. Geometrien skal derfor ikke modellere et bestemt eksperiment, men man kan for eksempel forestille sig at vi betragter en isokor situation. Den indgående varmekapacitet vil dermed blive c_V . Jeg vil dog undlade at præcisere hvilken situation der betragtes, det vil sige de indgående varmekapacitter vil afhænge af det betragtede eksperiment.

5.1 Den én-dimensionale analytiske løsning

Jeg kigger nu på et tilfælde, hvor domænet er en linie fra $x = 0$ til $x = L$, med varmekilden placeret i $x = 0$. I dette domæne løses diffusionsligningen på kompleks form:

$$i\omega c T_\omega + \lambda \frac{\partial^2 T_\omega}{\partial x^2} = 0, \quad (5.1.1)$$

med tilhørende randbetingelser. Denne ligning er et eksempel på en helmholtz ligning, hvis generelle løsning er en linearkombination af komplekse eksponentialfunktioner, det vil sige

$$T_\omega(x) = A_1 e^{-ikx} + A_2 e^{ikx}. \quad (5.1.2)$$

Dispersionsrelationen bestemmes ved at sætte ligning 5.1.2 ind i diffusionsligningen, hvilket giver følgende sammenhæng mellem k og ω

$$i\omega c T_\omega - k^2 \lambda T_\omega = 0 \Leftrightarrow k = \sqrt{\frac{i\omega c}{\lambda}} = (i+1)\sqrt{\frac{\omega c}{2\lambda}}. \quad (5.1.3)$$

Da k 's real- og imaginærdel er lige store er løsningen (eller mere præcist $(A_1 e^{-ikx})$ -delen af den) altså en dæmpet bølge, der afhængig af frekvensen kun når ud til en given længde (den er eksponentielt dæmpet så den forsvinder selvfølgelig aldrig helt). Vi kan af ligning 5.1.2 – eller udfra enhederne af c , λ og ω – se at realdelen af k har dimension længde i minus første. Én over realdelen definerer altså en karakteristisk frekvensafhængig længde for systemet, der netop er et mål for hvor langt væk man skal før den diffusive bølge tilnærmedesvis er døet ud. Dette kaldes diffusionsbølgelængden l_D , det vil sige

$$l_D = \sqrt{\frac{2\lambda}{\omega c}}. \quad (5.1.4)$$

Konstanterne A_1 og A_2 kan findes ved hjælp af randbetingelserne for den situation man betragter. Alternativt kan man opskrive en overføringsmatrix, der beskriver sammenhængen mellem temperatur og varmestrøm to forskellige steder i domænet. Det vil jeg nu gøre, idet denne fremgangsmåde gør det lettere at finde den termiske admittans Y for forskellige situationer. Udfra ligning 5.1.2 og Fouriers lov findes varmestrømmen:

$$j_{Q,\omega}(x) = -\lambda \frac{\partial T_\omega(x)}{\partial x} = \lambda ik(A_1 e^{-ikx} - A_2 e^{ikx}). \quad (5.1.5)$$

Sammenhængen mellem temperatur, varmestrøm og konstanterne A_1, A_2 er altså i punktet x givet ved:

$$\begin{pmatrix} T_\omega(x) \\ j_{Q,\omega}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ikx} & e^{ikx} \\ \lambda ik e^{-ikx} & -\lambda ik e^{ikx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}(x) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}. \quad (5.1.6)$$

Sættes $x = 0$ fås:

$$\begin{pmatrix} T_\omega(0) \\ j_{Q,\omega}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \lambda ik & -\lambda ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}(0) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}. \quad (5.1.7)$$

Man kan nu finde et udtryk for vektoren (A_1, A_2) i ligning 5.1.7 ved at gange ligningen fra venstre med $\underline{\underline{M}}(0)^{-1}$. Det fundne udtryk for (A_1, A_2) indsættes i ligning 5.1.6:

$$\begin{pmatrix} T_\omega(x) \\ j_{Q,\omega}(x) \end{pmatrix} = \underline{\underline{M}}(x) \underline{\underline{M}}(0)^{-1} \begin{pmatrix} T_\omega(0) \\ j_{Q,\omega}(0) \end{pmatrix} = \underline{\underline{T}}(x, 0) \begin{pmatrix} T_\omega(0) \\ j_{Q,\omega}(0) \end{pmatrix}, \quad (5.1.8)$$

hvor

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}(x, 0) &= \underline{\underline{M}}(x) \underline{\underline{M}}(0)^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-ikx} & e^{ikx} \\ \lambda ik e^{-ikx} & -\lambda ik e^{ikx} \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{k\lambda} \\ 1 & \frac{i}{k\lambda} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-ikx} + e^{ikx} & \frac{i}{k\lambda} (e^{ikx} - e^{-ikx}) \\ \lambda ik (e^{-ikx} - e^{ikx}) & e^{-ikx} + e^{ikx} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

Her angiver overføringsmatricen ($\underline{T}(x, 0)$) sammenhængen mellem temperatur og varmestrøm i punktet 0 henholdsvis x . Der er selvfølgelig ikke noget specielt ved punktet 0, overføringsmatricen kunne også opskrives for sammenhængen mellem to vilkårlige punkter. Når jeg vælger at gøre det for punktet 0 er det dels for overskuelighedens skyld og dels fordi det rent faktisk er i punktet 0, hvor varmepladen sidder at jeg er interesseret i T og j_Q .

5.1.1 Den termiske admittans for adiabatiske randbetingelser

Udfra overføringsmatricen kan man nu finde den termiske admittans for forskellige randbetingelser. For en adiabatisk rand i $x = L$, det vil sige $j_{Q,\omega}(L) = 0$, fås ved indsættelse i overføringsmatricen (ligning 5.1.8 og 5.1.9)

$$\begin{aligned} j_{Q,\omega}(L) &= 0 \\ \Updownarrow \\ \lambda ik(e^{-ikL} - e^{ikL}) \cdot T_\omega(0) + (e^{-ikL} + e^{ikL}) \cdot j_{Q,\omega}(0) &= 0. \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Herudfra findes Y som forholdet mellem varmestrømmen og temperaturen i 0:

$$Y(\omega) = \frac{j_{Q,\omega}(0)}{T_\omega(0)} = -\frac{\lambda ik(e^{-ikL} - e^{ikL})}{(e^{-ikL} + e^{ikL})} = -\frac{\lambda ik(1 - e^{2ikL})}{(1 + e^{2ikL})}. \quad (5.1.11)$$

Man kan nu betragte to grænsetilfælde, nemlig $l_D \ll L$ og $l_D \gg L$.

Først betragtes tilfældet $l_D \ll L$. Her vil ledet $e^{2ikL} = e^{-2L/l_D} e^{2iL/l_D} \approx 0$, det vil sige

$$Y(\omega) \approx -\lambda ik = \sqrt{-i\omega c \lambda} = (1-i)\sqrt{\frac{\omega c \lambda}{2}}. \quad (5.1.12)$$

Herefter betragtes tilfældet $l_D \gg L$. Ved en rækkeudvikling til første orden fås

$$e^{2ikL} = e^{-2(1-i)L/l_D} \approx 1 - 2(1-i)L/l_D, \quad (5.1.13)$$

det vil sige:

$$Y(\omega) \approx -\frac{\lambda ik(2(1-i)\frac{L}{l_D})}{2 - 2(1-i)\frac{L}{l_D}} \approx -\lambda ik(1-i)\frac{L}{l_D} = -i\omega c L, \quad (5.1.14)$$

hvor første 'lighedstegn' opnås ved at indsætte ligning 5.1.13 i ligning 5.1.11, det andet fås ved at udnytte at $L/l_D \approx 0$ og det sidste lighedstegn kommer af at indsætte udtrykkene for k (ligning 5.1.3) og l_D (ligning 5.1.4).

5.1.2 Den termiske admittans for isoterm randbettingelser

Man kan udføre tilsvarende beregninger for en isoterm randbettingelse i $x = L$, det vil sige $T_\omega(L) = 0$, her fås generelt

$$Y(\omega) = \frac{\lambda ik(1 + e^{2ikL})}{(e^{2ikL} - 1)}. \quad (5.1.15)$$

Og i de to grænser:

$$\begin{aligned} Y(\omega) &\approx (1 - i)\sqrt{\frac{\omega c \lambda}{2}} \quad \text{for } l_D \ll L \\ Y(\omega) &\approx \frac{\lambda}{L} \quad \text{for } l_D \gg L \end{aligned} \quad (5.1.16)$$

Det ses altså, at i grænsen $l_D \ll L$ er der ikke forskel på, om man betragter en adiabatisk eller en isoterm rand i $x = L$. Dette svarer simpelthen til at den diffusive bølge når at dø ud længe før randen.

I grænsen $l_D \gg L$ er der derimod forskel på om man betragter en adiabatisk eller isoterm rand i $x = L$. Betingelsen $l_D \gg L$ svarer jo til at vi har meget små frekvenser. Dette betyder at vi i det isotermte tilfælde kan betragte det, som om der er en konstant gradient gennem væskens fra $x = 0$ til $x = L$. Al varmen strømmer dermed ud til den isotermte rand, hvor den forsvinder. Hermed bliver den termiske admittans et udtryk for væskens varmeledningsevne.

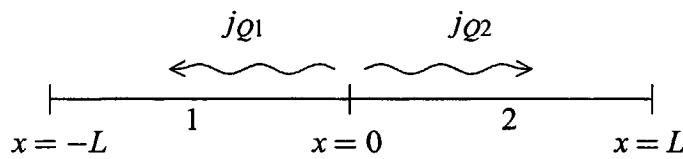
For de adiabatiske randbettingelser derimod er der ikke noget varme der forsvinder. Varmen strømmer altså ud i et 'reservoir', hvor den oplages og admittansen bliver dermed et udtryk for varmekapaciteten.

5.1.3 1D diffusion i to forskellige materialer

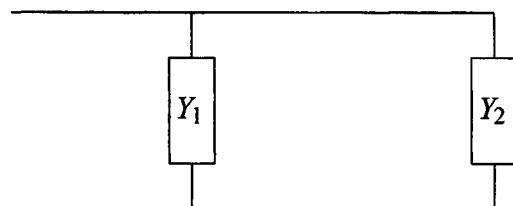
Jeg kigger nu på et tilfælde, hvor der er varmeudbredelse i én dimension, men både i den positive og den negative retning. Domænet er altså en linie fra $x = -L$ til $x = L$, med varmekilden placeret i $x = 0$ (se figur 5.1). I den situation, hvor der ikke er det samme materiale på begge sider af varmekilden vil materialeparametrene λ og $c(\omega)$ have en værdi på den positive akse og en anden på den negative.

Da temperaturen må være den samme i $x = 0$, uanset om man kommer fra højre eller venstre og den samlede varmestrøm væk fra kilden i $x = 0$ er summen af strømme til de to sider, kan man modellere denne situation som en parallelforbindelse af admittanser, se figur 5.2. Den samlede admittans bliver summen af admittanser i de to domæner:

$$Y(\omega) = Y_1(\omega) + Y_2(\omega). \quad (5.1.17)$$



Figur 5.1 Et domæne med éndimensional varmeudbredelse i både den negative (domæne 1) og den positive (domæne 2) retning. Varmekilden er placeret i $x = 0$. j_{Q1} og j_{Q2} betegner varmestrømmen ud i henholdsvis domæne 1 og 2.



Figur 5.2 En parallelforbindelse af admittanser, der modellerer situationen i figur 5.1. Y_1 er admittansen af domæne 1 og Y_2 er admittansen af domæne 2.

I det tilfælde hvor der er adiabatiske rande i $x = -L$ og $x = L$ fås fra ligning 5.1.11

$$Y(\omega) = -\frac{\lambda_1 ik_1 (1 - e^{2ik_1 L})}{(1 + e^{2ik_1 L})} - \frac{\lambda_2 ik_2 (1 - e^{2ik_2 L})}{(1 + e^{2ik_2 L})}, \quad (5.1.18)$$

hvor k_1 og k_2 er givet ved dispersionsrelationen (ligning 5.1.3). I de to grænser fås tilsvarende

$$Y(\omega) \approx (1 - i)\left(\sqrt{\frac{\omega c_1 \lambda_1}{2}} + \sqrt{\frac{\omega c_2 \lambda_2}{2}}\right) \quad \text{for } l_D \ll L \quad (5.1.19)$$

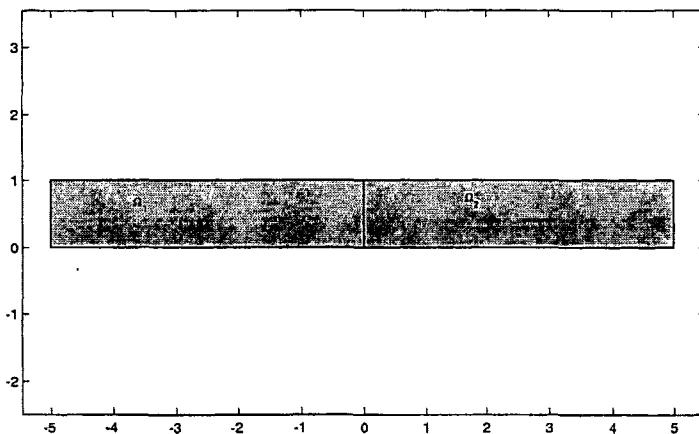
$$Y(\omega) \approx -i\omega L(c_1 + c_2) \quad \text{for } l_D \gg L \quad (5.1.20)$$

5.2 Den endimensionale numeriske løsning

Jeg vil i det følgende sammenligne numeriske én-dimensionale løsninger fra Femlab, med de analytiske løsninger udledt i afsnit 5.1. Dette vil jeg gøre for en geometri bestående af to forskellige materialer, hvor varmekilden er placeret på randen mellem dem, svarende til det i afsnit 5.1.3 behandlede tilfælde.

5.2.1 Geometrien

Den anvendte geometri ser ud som i figur 5.3. Når jeg har lavet en geometri med en endelig tykkelse i stedet for en 'ægte' endimensional geometri er det for at illustrere hvordan Femlab laver gitteret. Geometrien skal som sagt ikke modellere et bestemt eksperiment.



Figur 5.3 Her ses den anvendte geometri for den én-dimensionale numeriske løsning med de to domæner Ω_1 og Ω_2 .

5.2.2 Ligningerne og randbettingelserne

Ligningerne der løses i de to domæner er

$$\begin{aligned} i\omega c_1 T_\omega + \lambda_1 \nabla^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_1 \\ i\omega c_2 T_\omega + \lambda_2 \nabla^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_2, \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

hvor c_1 og c_2 er varmekapaciteterne i henholdsvis domæne 1 og domæne 2 og λ_1 og λ_2 er varmeledningsevnerne i domæne 1 og 2.

Randbettingelserne sættes til adiabatiske på alle ydre rande og på den indre rand specificeres varmestrømmen pr. areal:

$$j_{Q,\omega} = j_{Q1,\omega} + j_{Q2,\omega} = \lambda_1 \nabla_1 T_\omega - \lambda_2 \nabla_2 T_\omega = 1 \frac{\text{Energi}}{\text{tid} \cdot \text{Areal}}, \quad (5.2.2)$$

hvor gradienterne her er 'pseudo'gradienter, der kun er defineret på de respektive domæner. Det vil sige ∇_1 er gradienten fra venstre i den indre rand. Således er det den samlede varmestrøm der styres.

Ligningerne og randbettingelserne sættes nu ind i Femlab, med materialeparametrene $c_1 = 1$, $c_2 = 2$, $\lambda_1 = 1$ og $\lambda_2 = 1$. For disse værdier fås, for $\omega = 1$, diffusionslængden i Ω_1 til

$$l_{D1} = \sqrt{\frac{2\lambda_1}{\omega c_1}} = \sqrt{2} \approx 1.4 \quad (5.2.3)$$

og i Ω_2 til

$$l_{D2} = \sqrt{\frac{2\lambda_2}{\omega c_2}} = 1. \quad (5.2.4)$$

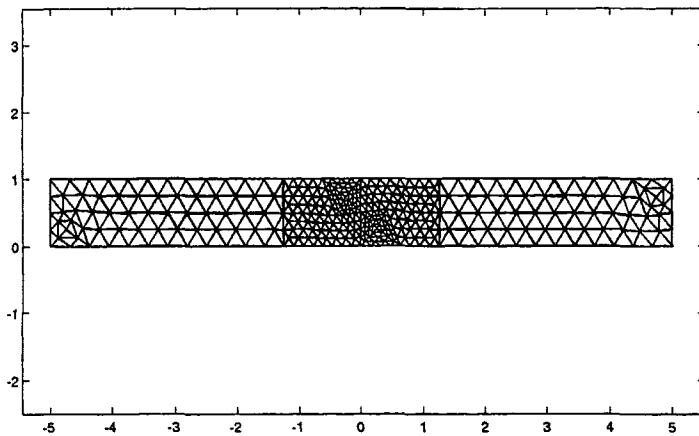
5.2.3 Løsningen

Femlab genererer nu det gitter af trekantede elementer, der er udgangspunktet for løsningen. Gitteret for denne geometri ses i figur 5.4.

Diffusionslængden er et mål for den længdeskala hvorpå de væsentligste temperaturændringer foregår. Jo mindre diffusionslængden er jo finere skal gitteret altså være, hvilket betyder at gitteret skal blive finere jo tættere man kommer på varmepladen. På figur 5.4 har jeg derfor manuelt gjort gitteret finere omkring grænsen mellem de to domæner, hvor varmepladen sidder. At gitteret ikke er symmetrisk skyldes den numeriske algoritme i Femlab og har ikke nogen fysisk årsag.

Herefter kan ligningerne løses numerisk. Løsningen for $\omega = 1$ ses i figur 5.5, hvor den numeriske temperaturprofil er plottet fra $(-5, 0.5)$ til $(5, 0.5)$. Her ses også den analytiske løsning

$$T_{\omega 1}(x) = A_1 e^{-ik_1 x} + A_2 e^{ik_1 x} \quad \text{på} \quad \Omega_1$$



Figur 5.4 Gitteret der danner udgangspunkt for løsningen af ligningerne 5.2.1 med de adiabatiske randbetingelser (5.2.2) for geometrien i figur 5.3.

$$T_{\omega 2}(x) = A_3 e^{-ik_2 x} + A_4 e^{ik_2 x} \quad \text{på} \quad \Omega_2, \quad (5.2.5)$$

hvor k_1 og k_2 er givet ved ligning 5.1.3 og konstanterne A_1 , A_2 , A_3 og A_4 findes ved løsning af ligningerne 5.2.5 i det kommersielle symbolmanipulations-program Maple7 med randbetingelserne $j_{Q1,\omega}(0) + j_{Q2,\omega}(0) = 1$, $j_{Q1,\omega}(-5) = j_{Q2,\omega}(5) = 0$ og $T_{\omega 1}(0) = T_{\omega 2}(0)$.

Udtrykkene for konstanterne vil jeg ikke gengive her, men den fulde analytiske løsning givet ved ligningerne 5.2.5 ses som sagt i figur 5.5.

Den numeriske løsning ses at være i fin overensstemmelse med den analytiske.

5.2.4 Den termiske admittans

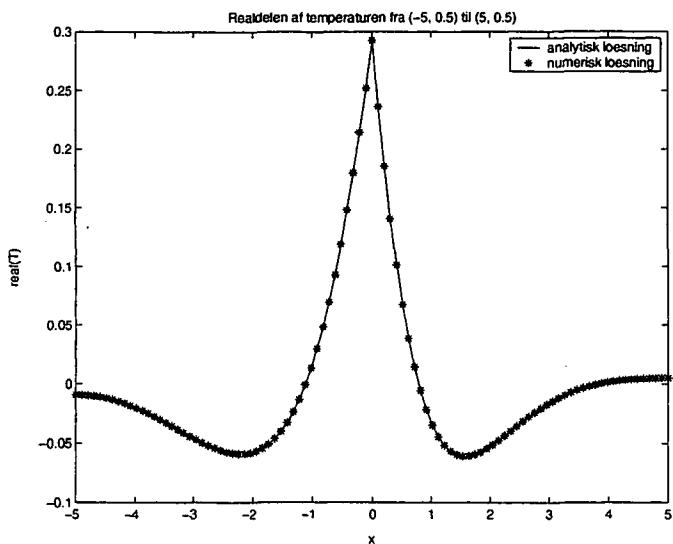
Herefter løses problemet numerisk for ω logaritmisk fordelt mellem 10^{-4} og 10^3 (tid^{-1}) og den termiske admittans findes som

$$Y_{num}(\omega) = \frac{j_{Q,\omega}(0)}{T_{\omega}(0)} = \frac{1}{T_{\omega}(0)} = \frac{T'_{\omega}(0) - iT''_{\omega}(0)}{T'^2_{\omega}(0) + T''^2_{\omega}(0)}, \quad (5.2.6)$$

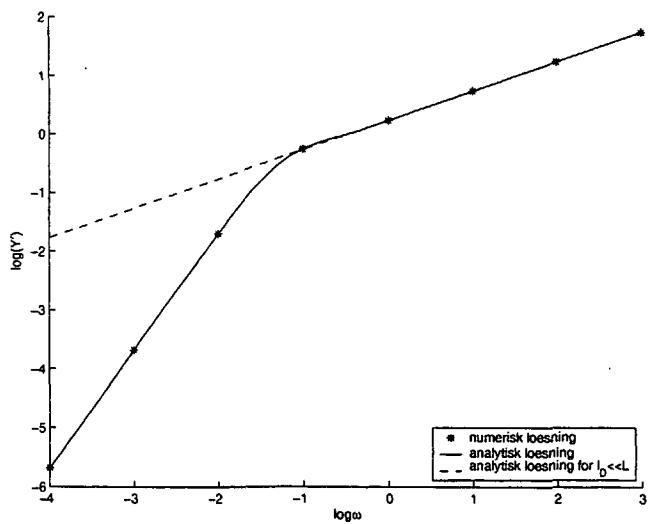
hvor T'_{ω} er realdelen og T''_{ω} er imaginærdelen af temperaturen og Y_{num} betegner den numerisk bestemte admittans. Man skal bemærke at dette er den termiske admittans per areal, da varmestrømmen er angivet per areal (ligning 5.2.2).

I figur 5.6 er logaritmen til realdelen af admittansen plottet mod logaritmen til frekvensen for den numeriske og henholdsvis den 'fulde' analytiske løsning (ligning 5.1.18) og approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19):

$$Y'(\omega) = \sqrt{\frac{\omega}{2}} + \sqrt{\omega} \quad (5.2.7)$$



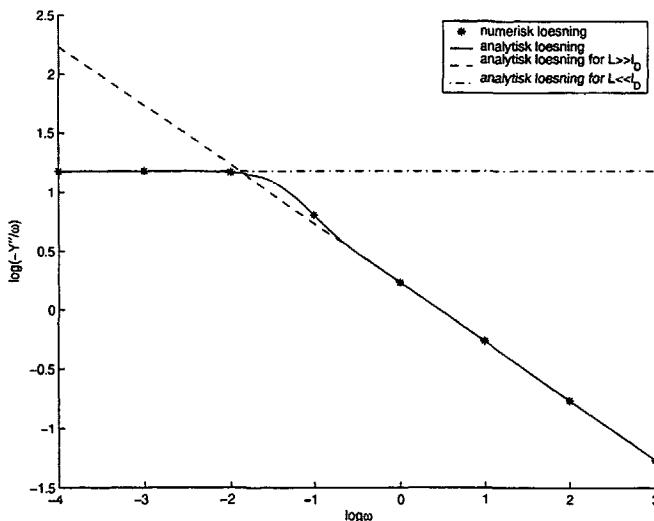
Figur 5.5 På figuren vises realdelen af temperaturen fra $(-5, 0.5)$ til $(5, 0.5)$ fundet ved numerisk løsning af ligningerne 5.2.1 med adiabatiske randbetingelser, samt den fulde analytiske løsning (ligningerne 5.2.5) for $\omega = 1$, $c_1 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1$ og $c_2 = 2$.



Figur 5.6 Et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 5.2.1 med adiabatiske randbetingelser, for ω fra 10^{-4} til 10^3 og $c_1 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1$, $c_2 = 2$. Den fulde analytiske løsning (ligning 5.1.18) er plottet med den fuldt optrukne, approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19) med den stippled linje.

Igen kan man se at den numeriske løsning er fint i overensstemmelse med den analytiske. Derudover viser figuren hvor den analytiske approksimation for grænsetilfældet $l_D \ll L$ er brugbar. For $\log \omega \geq -\frac{1}{2}$, eller $\omega \geq \frac{1}{\sqrt{10}} \approx 0.3$, kan man på den viste skala ikke se forskel på approksimationen og den fulde analytiske løsning. Denne værdi af ω afhænger selvfølgelig af de involverede parametre c og λ via diffusionslængden. For $\omega = \frac{1}{\sqrt{10}}$ er $l_{D1} \approx 2.5$. Det kunne derfor umiddelbart virke som om, at den analytiske højfrekvente approksimation til den fulde løsning er god så længe den længste diffusionslængde, der er involveret er mindre end $\frac{L}{2}$. Man kan altså også højest forvente at den tredimensionale løsning kan beskrives ved denne højfrekvente, endimensionale approksimation når diffusionslængderne er mindre end $\frac{L}{2}$.

I figur 5.7 er logaritmen til minus imaginærdelen af admittansen over frekvensen ($\log(-\frac{Y''_{num}(\omega)}{\omega})$) plottet mod logaritmen til frekvensen for den numeriske løsning. I samme figur er imaginærdelen af den fulde analytiske løsning (ligning 5.1.18)



Figur 5.7 Et logaritmisk plot af minus imaginærdelen af den termiske admittans, divideret med ω , fundet ved løsning af ligningerne 5.2.1 med adiabatiske randbetingelser. ω går fra 10^{-4} til 10^3 og $c_1 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1$, $c_2 = 2$. Imaginærdelen af den fulde analytiske løsning (ligning 5.1.18) er plottet med den fuldt optrukne, approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19) med den stiplede linje og approksimationen for lave frekvenser (ligning 5.1.20) med den prikkede/stiplede linje (-·).

plottet med den fuldt optrukne linje. Approksimationen for høje frekvenser ($l_D \ll L$) fås fra ligning 5.1.19:

$$Y''(\omega) = -\left(\sqrt{\frac{\omega}{2}} + \sqrt{\omega}\right) \Rightarrow \log\left(-\frac{Y''(\omega)}{\omega}\right) = \log\left(\frac{1}{\sqrt{2\omega}} + \frac{1}{\sqrt{\omega}}\right) \quad (5.2.8)$$

Denne er plottet med den stiplede linje.

Approximationen for lave frekvenser ($l_D \gg L$) fås fra ligning 5.1.20:

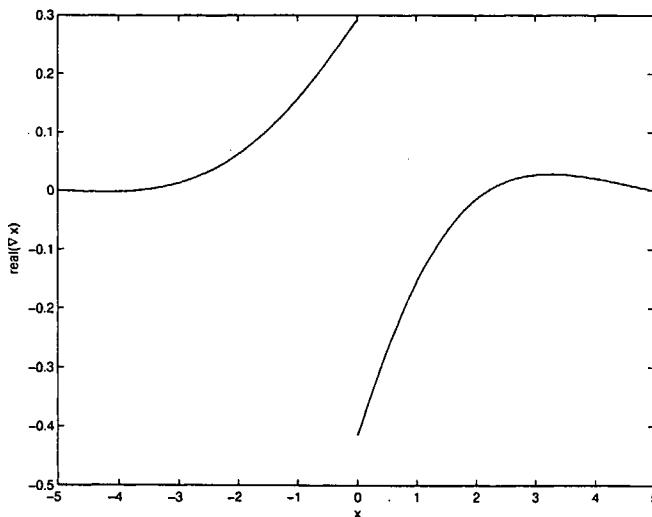
$$Y''(\omega) = -\omega \cdot 5(1+2) \Rightarrow \log\left(-\frac{Y'(\omega)}{\omega}\right) = \log(15) \approx 1.2 \quad (5.2.9)$$

Denne er plottet med den prikkede/stippled linje (—). Her ses som før at den numeriske løsning passer fint med den analytiske og at den højfrekvente analytiske approximation er god for $\log \omega \geq -\frac{1}{2}$, mens den lavfrekvente er god for $\log \omega \leq -2.3$.

Disse figurer illustrerer hvordan realdelen af admittansen går mod 0 og imaginærdelen af admittansen, over frekvensen, går mod varmekapaciteten for systemet for frekvensen gående mod 0.

5.2.5 Randbetingelsen for varmestrømmen

Til sidst vil jeg gerne illustrere at Femlab behandler randbetingelsen 5.2.2 rigtigt, hvilket ikke var helt oplagt udfra manualen. Dette er en rand mellem to materialer med forskellige materialeparametre, hvor der tilføres varme til systemet. For at kunne illustrere det, har jeg lavet en ny løsning, hvor de to materialer har forskellige varmeledningsevner, men samme varmekapaciteter. Jeg sætter $\lambda_1 = 2$ og $c_1 = c_2 = \lambda_2 = 1$. En graf der viser gradienten fra $x = -5$ til $x = 5$ ses i figur 5.8.



Figur 5.8

Den samlede varmestrøm i $x = 0$ fås, ved at benytte ligning 5.2.2, til

$$j_{Q,\omega} = j_{Q1,\omega} + j_{Q2,\omega} = \lambda_1 \nabla_1 T_\omega - \lambda_2 \nabla_2 T_\omega = 2 \cdot 0.2926 - 1 \cdot (-0.4146) = 0.9998 \frac{\text{Energi}}{\text{tid} \cdot \text{Areal}},$$

Dette må siges at være tilstrækkeligt tæt på én til at jeg kan konkludere, at Femlab behandler denne randbetingelse som ønsket.

5.3 Opsamling

Disse indledende undersøgelser viser at de numeriske løsninger i én dimension er sammenfaldende med de analytiske. Derfor vil jeg betragte de numeriske løsninger for mere komplicerede, to- og tre-dimensionelle situationer som pålidelige, sålænge den opnåede numeriske løsning bare har konvergeret (som funktion af 'gitterfinheden'). Desuden antyder disse én-dimensionale undersøgelser, at den højfrekvente analytiske approksimation **højst** kan være god, sålænge den længste difusionslængde, der er involveret, er mindre end $\frac{L}{2}$.

Herudover viser undersøgelsene at programmet håndterer randbetingelser på en indre rand, hvor der varmes og hvor den samlede varmestrøm ud i de to domæner er kendt, på en fysisk konsistent måde. Det vil sige at der hverken dannes eller forsvinder energi, som der ikke er taget højde for.

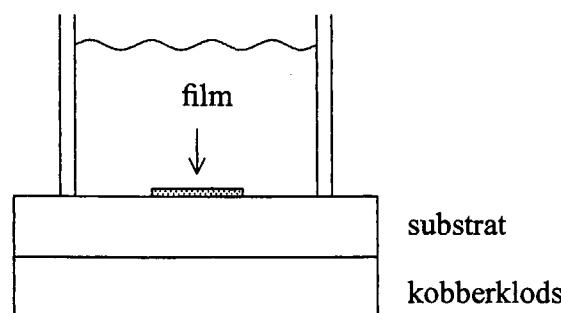
Når jeg fremover, ved behandlingen af det termiske randeffektproblem, henviser til én-dimensionale analytiske approksimationer vil det være ligningerne 5.1.12 og 5.1.14 , der menes for de adiabatiske situationer, og ligningerne 5.1.16, der menes for isotermiske situationer.

6 Numerisk løsning af det tre-dimensionale termiske randeffektproblem

I dette kapitel vil jeg løse den almindelige diffusionsligning for eksperimentet brugt af Claus Behrens, IMFUFA. Først vil jeg beskrive opstillingen og de randeffektproblemer man kan forvente. Derefter vil jeg beskrive hvordan geometrien, randbetingelserne og ligningerne er modelleret i Femlab. Derefter vil jeg gå over til at vise udvalgte plot af den termiske admittans som funktion af frekvensen og de indgående parametre.

6.1 Den modellerede geometri

Den geometri jeg ønsker at løse diffusionsligningen med tilhørende randbetingelser for, er som sagt en geometri, der skal afspejle den eksperimentelle opstilling benyttet af Claus Behrens. I figur 6.1 ses en skitse af opstillingen, i et tværsnit.

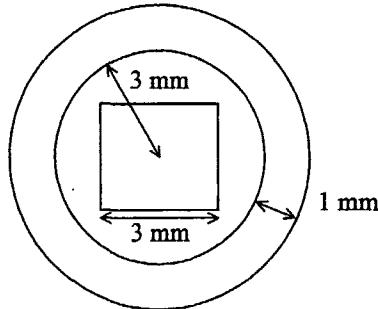


Figur 6.1 Skitse af Claus Behrens' opstilling. Det skal bemærkes at den ikke er i de rette størrelsesforhold.

Varmefilmen er placeret på et substrat af glas og ovenpå dette placeres et glasrør med væsken i. Bag på substratet sidder en kobberklods, der er termisk clampet til kryostaten, det vil sige at den har en nogenlunde konstant temperatur. Denne klods

leder den producerede DC varme væk, så den ikke skal ledes væk gennem væsken. Derved kan man antage at der ikke er en konstant temperaturgradient i væsken.

Varmefilmen er kvadratisk, med sidelængder 3 mm , mens glasrøret er en cylinder, med indre diameter 6 mm , og ydre diameter 8 mm , se figur 6.2 der viser en skitse af opstillingen set fra oven. Tykkelsen af glasrøret er altså 1 mm og substratets tykkelse er ligeledes 1 mm , mens varmefilmens tykkelse er i størrelsesordenen μm .



Figur 6.2 Skitse af opstillingen set ovenfra, med varmepladen i midten og glasrøret yderst. Endvidere er størrelsesforholdene angivet.

Man kan forvente flere randeffektproblemer for denne opstilling. Der vil dels opstå en randeffekt når diffusionslængden bliver sammenlignelig med dimensionen af varmepladen. Men herudover vil der også opstå randeffekter når diffusionslængden bliver sammenlignelig med tykkelsen af substratet, svarende til at admittansen kan 'se' kobberkloden, og når diffusionslængden bliver sammenlignelig med afstanden ud til glasrøret. Man kan på grund af størrelsesforholdene i opstillingen forvente at randeffekten hidrørende fra kobberkloden vil optræde for den højeste frekvens, derefter den hidrørende fra filmen og for den laveste frekvens randeffekten hidrørende fra glasrøret. Det vil dog sikkert ikke være muligt at skelne de tre bidrag fra hinanden.

6.2 Opstilling af model i Femlab

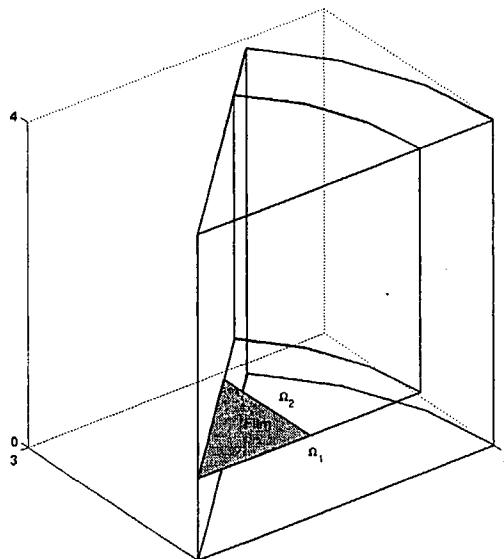
Jeg skal altså have denne opstilling repræsenteret ved en geometri, nogle randbedingelser og ligninger, som jeg kan indsætte i Femlab.

6.2.1 Geometrien

Jeg vil starte med at antage at glasrøret, der indeholder prøven og substratet, hvorpå filmen sidder, har nogenlunde samme materialeparametre c og λ , så jeg kan mo-

dellere dem som en sammenhængende cylinder med bund, men uden låg. Kobberklosen medtages ikke direkte i geometrien, men modelleres som en isotherm randbetningelse i bunden af cylinderen. Tykkelsen af varmefilmen er meget lille i forhold til de andre involverede størrelser, hvorfor jeg vil antage at den ikke har nogen tykkelse og altså bare er en to dimensional flade i den tredimensionale geometri. Denne forsimpling har den fordel at jeg dermed kan modellere varmestrømmen som en randbetningelse på denne flade og dermed bliver fri for at modellere den som en varmekilde i filmen.

Disse forsimplinger giver en geometri, der består af en indre cylinder af væsken, med en cylinderskal af glas udenpå. Varmepladen er en kvadratisk todimensional flade i bunden af væskecyllinderen. På grund af denne geometris symmetri kan man nøjes med at løse problemet i en ottendedel cylinder, et 'lagkagestykke' som vist i figur 6.3.



Figur 6.3 Figuren viser den geometri, der er implementeret i Femlab. Denne udgør på grund af symmetri kun en ottendedel af den forsimplede cylinder, der skal beskrive opstillingen beskrevet i afsnit 6.1. På figuren er angivet de to domæner og varmefilmen.

6.2.2 Ligningerne

Den konstruerede geometri giver to domæner, nemlig glasrøret (Ω_1) og væsken (Ω_2), hvor diffusionsligningen skal løses med forskellige materialeparametre

$$\begin{aligned} i\omega c_1 T_\omega + \lambda_1 \nabla^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_1 \\ i\omega c_2 T_\omega + \lambda_2 \nabla^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_2, \end{aligned} \tag{6.2.1}$$

hvor c_1 og λ_1 er varmekapacitet og varmeledningsevne for glasrøret og c_2 og λ_2 er varmekapacitet og varmeledningsevne for væsken. Jeg vil ikke specificere nærmere hvilken varmekapacitet der indgår, men man kan for eksempel tænke på den som isobar. Det antages at glasrørets materialeparametre c_1 og λ_1 ikke afhænger af frekvensen.

Jeg vil gerne forsimple disse ligninger lidt, ved at indføre dimensionsløse variable. Temperaturen er defineret som temperaturamplituden i forhold til en referencetemperatur $T_\omega = \frac{\delta T}{T_0}$. Jeg vælger at skalere alle længder, det vil sige x, y og z i forhold til tykkelsen (d) af glasrøret. Vi har altså

$$x' = \frac{x}{d}, \quad y' = \frac{y}{d}, \quad z' = \frac{z}{d} \quad \text{og} \quad \nabla'^2 = d^2 \nabla^2.$$

Indføres disse størrelser, divideres begge ligninger med λ_1 , og ganges med d^2 fås

$$\begin{aligned} i\omega d^2 \frac{c_1}{\lambda_1} T_\omega + \nabla'^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_1 \\ i\omega d^2 \frac{c_2}{\lambda_1} T_\omega + \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \nabla'^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_2. \end{aligned} \quad (6.2.2)$$

Hvis vi antager at λ_2 ikke afhænger af frekvensen kan vi skrive $\lambda_2 = k_\lambda \lambda_1$, hvor k_λ er en reel konstant. Varmekapaciteten af væsken c_2 er den størrelse vi gerne vil finde, og om den ved vi kun at den er kompleks og frekvensafhængig. Derfor sættes $c_2 = k_c c_1$, hvor skaleringssparameteren k_c er kompleks og frekvensafhængig. Dermed bliver ligningssystemet

$$\begin{aligned} i\omega d^2 \frac{c_1}{\lambda_1} T_\omega + \nabla'^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_1 \\ i\omega d^2 k_c \frac{c_1}{\lambda_1} T_\omega + k_\lambda \nabla'^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_2. \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

Endelig indføres en dimensionslös frekvens $\omega' = \frac{\omega c_1 d^2}{2\lambda_1}$. Denne er valgt således at $\omega' = 1$ svarer til at diffusionslængden i glasset $l_{D,glas}$ er lig tykkelsen af glassubstratet, d , det vil sige i dette tilfælde 1. Alt i alt får ligningerne altså dette udseende

$$\begin{aligned} i2\omega T_\omega + \nabla^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_1 \\ i2\omega k_c T_\omega + k_\lambda \nabla^2 T_\omega &= 0 \quad \text{på} \quad \Omega_2, \end{aligned} \quad (6.2.4)$$

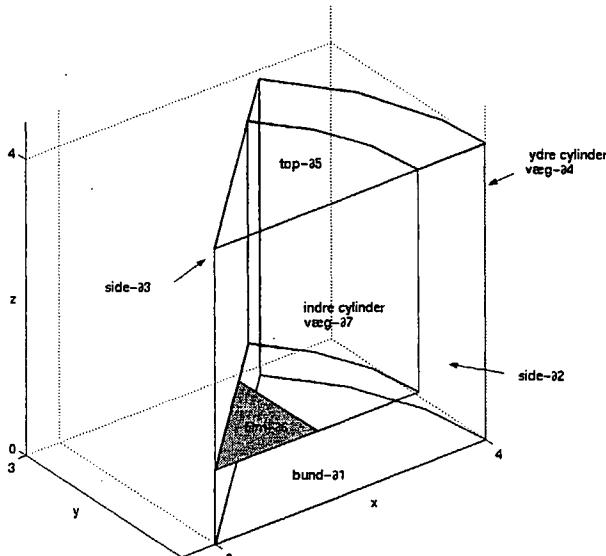
hvor mærkerne / er droppet.

Løsning af denne differentialligning giver altså en numerisk løsning for temperatuften som funktion af frekvensen, k_λ og k_c . Udfra denne kan den termiske admittans findes, som funktion af frekvensen, k_λ og k_c , $Y(\omega, k_\lambda, k_c)$.

Det er her k_c der svarer til den varmekapacitet, som vi gerne vil finde.

6.2.3 Randbettingelserne

I figur 6.4 ses geometrien med angivelse af randene, der er betegnet med symboleret ∂ . Cylinderens bund er i eksperimentet i termisk kontakt med kobberkloden. Dette modelleres som nævnt som en isoterm randbettingelse på lagkagestykkets bund $\partial 1$ (se figur 6.4). Lagkagestykkets sider og top $\partial 2 - \partial 5$ har alle adiabatiske randbe-



Figur 6.4 Figuren viser den modellerede geometri, med angivelse af de forskellige rande.

tingelser, men af lidt forskellige årsager. $\partial 2 - \partial 3$ har det på grund af symmetrien, mens $\partial 4 - \partial 5$ har det, idet vi antager at disse sider i eksperimentet er adiabatisk isolerede. Dermed mangler vi at betragte de indre rande mellem de to domæner, $\partial 6$ og $\partial 7$. Da $\partial 6$ er varmepladen skal der her være en varmestrøm ind i systemet. Her modelleres kun AC-effekten, der er beskrevet ved varmestrømsamplituden $j_{Q,\omega}$. Denne sættes til 1. På $\partial 7$ skal der gælde at temperaturen er den samme fra væske- og glassiden, det vil sige at temperaturen er kontinuert hen over randen, samt at der hverken tilføres eller fjernes energi ved randen. I min formulering af problemet i Femlab bliver temperaturen automotisk kontinuert hen over randen, idet det er gjort implicit at der søges efter kontinuerte løsninger. Alt i alt fås følgende randbettingelser

$$T = 0 \quad \text{på} \quad \partial 1$$

$$j_{Q,\omega} = \begin{cases} -\nabla T_\omega = 0 & \text{på } \partial 2 \cap \Omega_1, \partial 3 \cap \Omega_1, \partial 5 \cap \Omega_1 \\ -k_\lambda \nabla T_\omega = 0 & \text{på } \partial 2 \cap \Omega_2, \partial 3 \cap \Omega_2, \partial 5 \cap \Omega_2 \end{cases}$$

$$j_{Q,\omega} = -\nabla T_\omega = 0 \quad \text{på} \quad \partial 4$$

$$j_{Q,\omega} = j_{Q1,\omega} + j_{Q2,\omega} = \nabla T_\omega - k_\lambda \nabla T_\omega = 1 \quad \text{på} \quad \partial 6$$

$$j_{Q,\omega} = j_{Q1,\omega} + j_{Q2,\omega} = \nabla T_\omega - k_\lambda \nabla T_\omega = 0 \quad \text{på } \partial\Omega$$

hvor alle varmestrømmene er strømmene normal til de betragtede rande og ∇ igen er en pseudogradient, der kun er defineret fra den ene side. Strengt taget er det ikke varmestrømmene der defineres her, men varmestrømmene per λ_1 , analogt med formuleringen af ligningssystemet.

I forbindelse med formuleringen af disse randbetingelser har jeg undersøgt at formuleringen af betingelserne på de indre rande er fysisk konsistent, det vil sige at der ikke forsvinder eller opstår energi, som der ikke er gjort rede for, på tværs af disse rande. Dette skyldes igen at det ikke var helt tydeligt udfra manualen, hvordan disse randbetingelser håndteres. Filmen er en indre rand med varmestrøm til begge sider, hvilket er den samme situation som jeg undersøgte i afsnit 5.2.5. Formuleringen af randbetingelsen på $\partial\Omega$ er altså iorden og det viser sig at Femlab også håndterer betingelsen på $\partial\Omega$ efter hensigten.

Den beskrevne geometri, ligningerne og randbetingelserne indsættes i Femlab og det tredimensionale termiske problem kan nu løses for passende valg af parametre k_λ , k_c og ω .

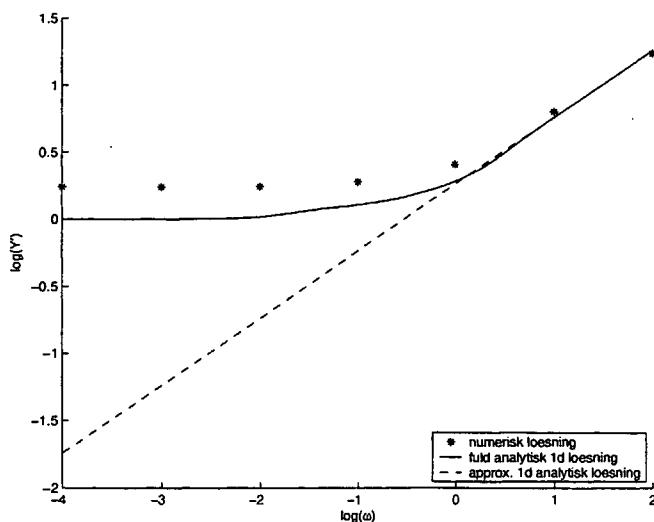
6.3 Løsninger

Jeg vælger at sætte k_λ lig forholdet mellem varmeledningsevnen for glycerol og for 'almindeligt' glas, som for eksempel vinduesglas. Varmeledningsevnen λ for glycerol findes i [Lide, 1999-2000][s. 6.186] til $0.292 \frac{W}{mK}$ ved $25^\circ C$, mens λ for glas findes til at være ca. $0.9 - 1.0 \frac{W}{mK}$ [Lide, 1999-2000][s. 12.202]. Varmeledningsevnen er altså omrent 3 gange så stor i glasbeholderen som i væskeren, det vil sige jeg sætter $k_\lambda = \frac{1}{3}$. Varmeledningsevnen afhænger af temperaturen, men da vi betragter lineære situationer, hvor temperaturvariationerne er små, kan man ihvertfald se bort fra temperaturafhængigheden af forholdet k_λ .

Nedenfor gennemgås nogle eksempler på løsninger, for nogle forskellige valg af værdier for k_c . Vi er strengt taget kun interesserede i den del af løsningen der angiver temperaturen på varmepladen da det er denne, der skal bruges til at finde admittansen. I det følgende vises kun de færdige numeriske resultater for de termiske admittanser.

6.3.1 Den termiske admittans for $k_\lambda = \frac{1}{3}$ og $k_c = 2$

Jeg vælger først at lade k_c være reel og frekvensuafhængig, for at starte med det mindst komplicerede tilfælde. Dette vil beskrive en 'almindelig' newtonsk væske. Varmekapaciteten vil - alt andet lige - være større for en væske end for glasrøret, det vil sige k_c skal være større end 1. Jeg sætter $k_c = 2$. I figur 6.5 ses et logaritmisk



Figur 6.5 Figuren viser et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 6.2.4 med randbetingelser formuleret i afsnit 6.2.3, for ω fra 10^{-4} til 10^2 og $k_c = 2$, $k_\lambda = \frac{1}{3}$. Herudover er den fulde analytiske én-dimensionale løsning plottet med den fuldt optrukne, 1d-approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19) med den stippled linje.

plot af realdelen af den termiske admittans mod frekvensen, hvor admittansen er udregnet som i ligning 5.2.6:

$$Y(\omega) = \frac{j_{Q,\omega}(\text{film})}{T_\omega(\text{film})} = \frac{1}{T_\omega(\text{film})} = \frac{T'_\omega(\text{film}) - iT''_\omega(\text{film})}{T'^2_\omega(\text{film}) + T''^2_\omega(\text{film})}, \quad (6.3.1)$$

hvor den numeriske værdi af den “ægte” varmestrøm $j_{Q,\omega}(\text{film})$ blot er et spørgsmål om dimensionering, så den kan vi sætte lig 1. Dette betyder på grund af formuleringen af randbetingelsen på filmen (Ø6), at også $\lambda_1 = 1$.

Real- og imaginærdel af filmens temperatur er fundet ved at integrere løsningen op over hele filmen og dividere med arealet af filmen:

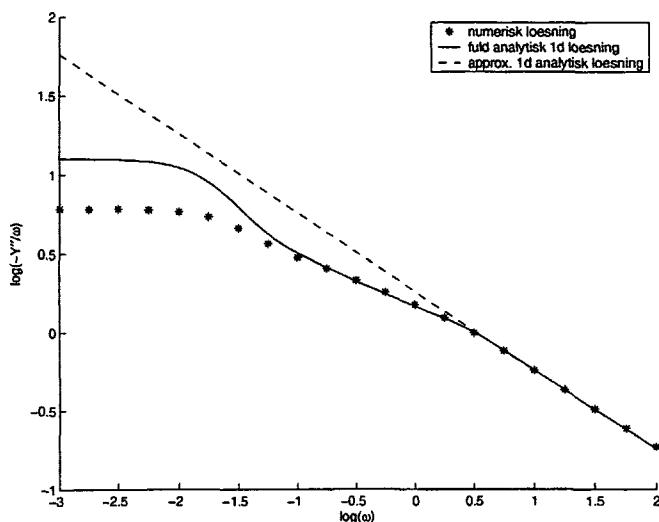
$$T_\omega(\text{film}) = \frac{\int_{\text{filmen}} T_\omega(x,y,1) dA}{1.125}. \quad (6.3.2)$$

Figur 6.5 viser også den højfrekvente én-dimensionale analytiske approksimation givet i ligning 5.1.19, der med den valgte formulering af ligningssystemet bliver:

$$Y(\omega) \approx (1 - i)(\sqrt{\omega} + \sqrt{\frac{2\omega}{3}}), \quad (6.3.3)$$

samt den fulde én-dimensionale analytiske løsning, der er fundet ved at addere ligning 5.1.15 for den isoterme rand, med ligning 5.1.11 for den adiabatiske rand og indsætte de relevante materialeparametre.

I figur 6.6 ses et logaritmisk plot af minus imaginærdelen af admittansen (over frekvensen), samt de tilhørende analytiske én-dimensionale løsninger.



Figur 6.6 Figuren viser et logaritmisk plot af minus imaginærdelen af den termiske admittans, over frekvensen, fundet ved løsning af ligningerne 6.2.4 med randbetingelser formuleret i afsnit 6.2.3, for ω fra 10^{-4} til 10^2 og $k_c = 2$, $k_\lambda = \frac{1}{3}$. Herudover er den fulde analytiske én-dimensionale løsning plottet med den fuldt optrukne, 1d-approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19) med den stippled linje.

For $\omega = 1$ er diffusionslængden i glasset som sagt $l_{D1}(1) = 1$, sådan som lignings-systemet er opstillet. Diffusionslængden i væsken ved $\omega = 1$ er $l_{D2}(1) = \sqrt{\frac{k_\lambda}{k_c}} = \sqrt{\frac{\frac{1}{3}}{2}} \approx 0.4$. Diffusionslængden er altså størst i glasbeholderen. Ifølge observationerne i afsnit 5.2.4 kan man derfor højest forvente at den én-dimensionale analytiske approksimation beskriver situationen tilfredsstillende når

$$l_{D1} = \sqrt{\frac{1}{\omega}} \leq \frac{1}{2} \Rightarrow \omega \geq 4 \Rightarrow \log(\omega) \geq 0.6.$$

Denne grænse passer meget godt med det, man observerer på figur 6.5 i forhold til hvornår den én-dimensionale approksimation afviger fra den fulde analytiske løsning. Man skal imidlertid op til frekvenser på 10-100 før det ser ud til at 1d-approksimationen kan siges at beskrive den tre-dimensionale numeriske admittans.

Grunden til at det sidste punkt, ved frekvensen 100, ligger under den analytiske løsning skyldes en numerisk 'fejl'. Diffusionslængden er her blevet så kort at det benyttede gitter ikke længere er fint nok. Dette kan selvfølgelig løses ved at gøre gitteret endnu finere. Der er dog i praksis en øvre grænse for hvor fint man kan gøre gitteret, da et fintere gitter kræver mere computertid og -hukommelse. Denne

grænse nås relativt hurtigt for dette tredimensionale problem. Jeg vil senere komme tilbage til hvor langt op i frekvens man kan tillade sig at stole på de opnåede numeriske resultater. For det rent termiske problem er det imidlertid ikke så vigtigt at kunne komme så højt op i frekvens; man skal bare være sikker på at man er kommet ind i det 'én-dimensionale område', så har vi styr på hvad der sker.

6.3.2 Løsning for en debye-relakserende varmekapacitet

Jeg vil nu lade c_2 være beskrevet ved en Debye-relaksation, der blev introduceret i afsnit 2.3. Jeg sætter

$$c_2(\omega) = k_c(\omega)c_1 = c_1\left(1 + \frac{1}{1+\omega^2} + i\frac{\omega}{1+\omega^2}\right), \quad (6.3.4)$$

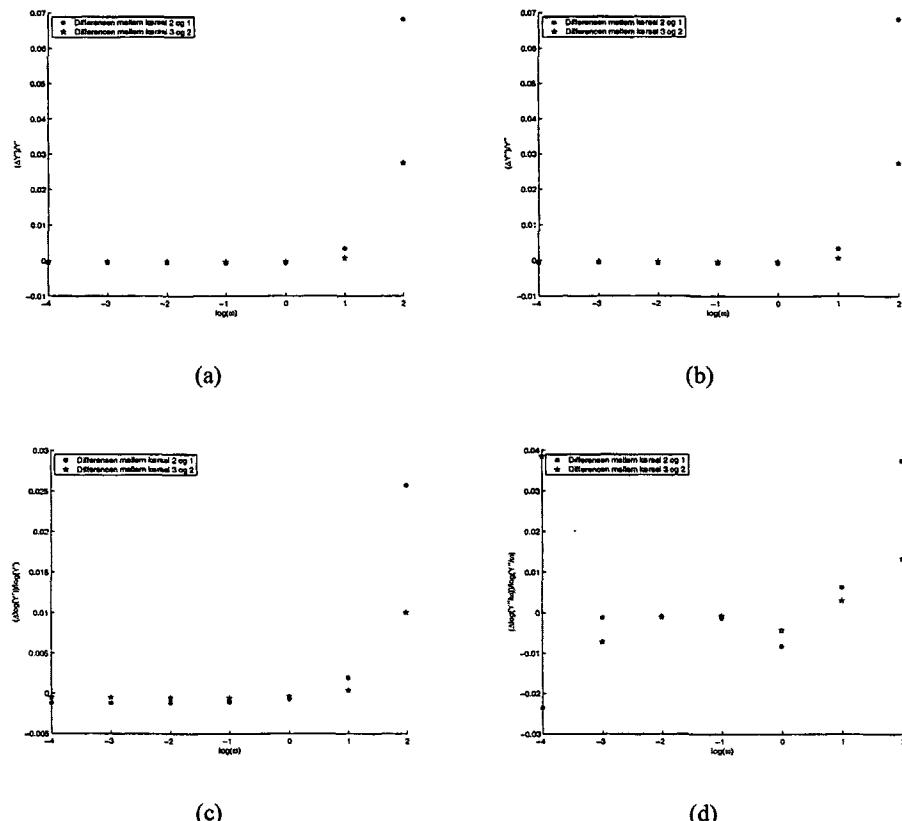
hvor τ_D er sat til 1, det vil sige $\omega = 1$ er en karakteristisk frekvens, og jeg har sat $c_{vib} = c_{konf} = c_1$. k_λ er stadigvæk $\frac{1}{3}$.

Først undersøges konvergensen af løsningen. Dette gøres ved at lave 3 kørsler af problemet i Femlab, med 3 forskellige gitre. Resultatet ses i figur 6.7, der viser de relative afvigelser mellem henholdsvis 1:(kørsel 2 og kørsel 1), og 2:(kørsel 3 og kørsel 2). Kørsel 1 har det groveste gitter og kørsel 3 det fineste. Det skal altså være sådan at 2: er tættere på 0 end 1: hvis løsningen konvergerer. Hvor tæt 2: ligger på 0 er desuden et mål for hvor god løsningen er for det benyttede gitter. Det ses ihvertfald tydeligt af de fire grafer at løsningen konvergerer når man forfiner gitteret. Det ser ud til at løsningen for $\omega = 100$ ikke helt er konvergeret endnu, men forskellene mellem kørsel 3 og 2 er dog under tre procent. Jeg vil derfor tillade mig at bruge resultaterne helt op til $\omega = 100$, dog med nogen forsigtighed. Dette bestyrkes af at resultatet her er omrent sammenfaldende med den analytiske 1d-approksimation.

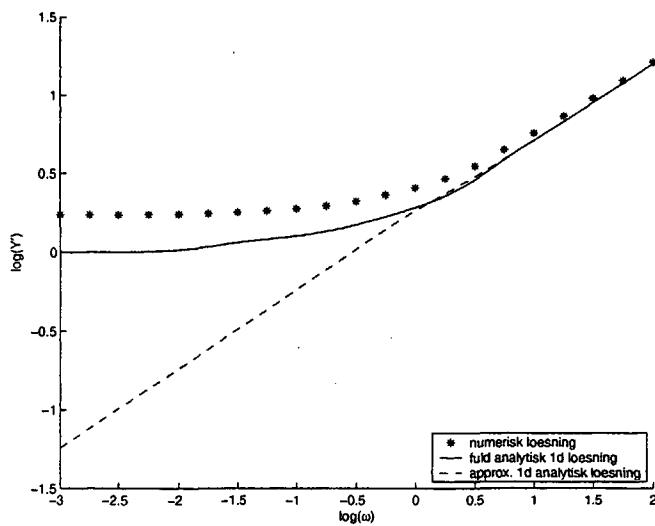
I figur 6.8 ses et logaritmisk plot af realdelen af admittansen og i figur 6.9 ses et logaritmisk plot af minus imaginærddelen (over frekvensen), samt de tilhørende analytiske én-dimensionale løsninger.

Endelig vises i figur 6.3.5 et plot af fasen (ϕ), der udregnes som

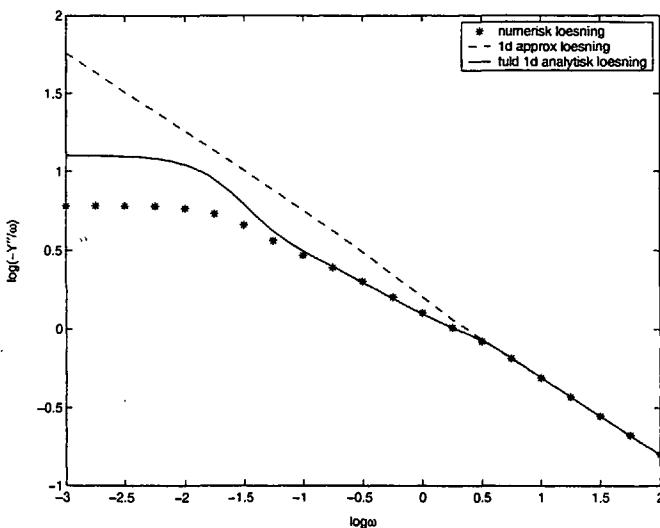
$$\phi = \text{invtan} \left(\frac{Y''}{Y'} \right). \quad (6.3.5)$$



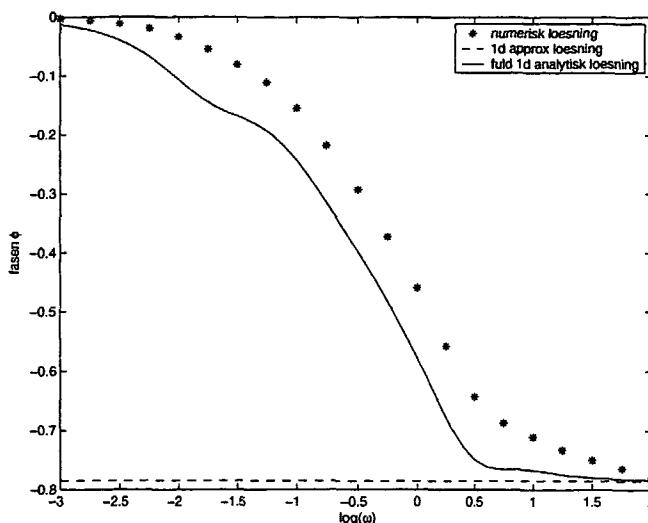
Figur 6.7 De relative afvigelser mellem to kørsler for henholdsvis realdelen a), imaginærdele b), logaritmen til realdelen c) og logaritmen til imaginærdenen over frekvensen d) af den numeriske termiske admittans, fundet med en debyerelakserende varmekapacitet.



Figur 6.8 Figuren viser et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 6.2.4 med randbetingelser formuleret i afsnit 6.2.3, for ω fra 10^{-4} til 10^2 og $k_\lambda = \frac{1}{3}$. k_c er beskrevet ved Debye-processen i ligning 6.3.4. Herudover er den fulde analytiske én-dimensionale løsning plotet med den fuldt optrukne, 1d-approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19) med den stipede linje.



Figur 6.9 Figuren viser et logaritmisk plot af minus imaginærdenen af den termiske admittans, over frekvensen, fundet ved løsning af ligningerne 6.2.4 med randbetingelser formuleret i afsnit 6.2.3, for ω fra 10^{-4} til 10^2 og $k_\lambda = \frac{1}{3}$. k_c er beskrevet ved Debye-processen i ligning 6.3.4. Herudover er den fulde analytiske én-dimensionale løsning plotet med den fuldt optrukne, 1d-approksimationen for høje frekvenser (ligning 5.1.19) med den stipede linje.



Figur 6.10 Fasen af den numeriske termiske admittans, samt fasen af den 1d analytiske løsning og -approksimation, fundet for ω fra 10^{-4} til 10^2 og $k_\lambda = \frac{1}{3}$. k_c er beskrevet ved Debye-processen i ligning 6.3.4.

6.4 Opsamling

Det ser ud til, udfra de foretagne undersøgelser af den beskrevne opstilling, at den analytiske én-dimensionale approksimation

$$Y(\omega) \approx (1 - i)(\sqrt{\omega} + \sqrt{\omega k_c k_\lambda}) \quad \text{for } l_D \ll L \quad (6.4.1)$$

er en god beskrivelse sålænge ω er større end 100. ω er egentlig den dimensionsløse frekvens ω' , hvor $\omega' = \frac{\omega c_1 d^2}{2\lambda_1}$, hvilket kan udnyttes til at regne tilbage til de 'virkelige' frekvenser. Man kan se at den termiske admittans for lave frekvenser både har en real- og en imaginærdel, der er forskellig fra 0. Dette svarer til at admittansen både 'ser' den isoterme rand i bunden af substratet og den adiabatiske rand i resten af cylinderen. Realdelen er domineret af den isoterme rand og det er ikke muligt at få øje på de andre randeffektproblemer i grafen for den. På grafen for imaginærdelen derimod, ser der ud til at være to 'knæk' både på den numeriske tre-dimensionale og den fulde analytiske en-dimensionale løsning. De er dog tydeligst for den analytiske løsning. Disse knæk ses både i en situation hvor varmekapaciteten er konstant og i den situation hvor den er relaksende, så de kan ikke skyldes Debye-relaksationen. For de lave frekvenser er varmekapaciteten den samme i de to situationer, når frekvensen stiger relakserer den ene varmekapacitet mod den halve værdi. Dette giver sig dog kun til udtryk i en parallelforskydning af kurven for høje frekvenser. Knækket i $\log(\omega) = -1.5$ på grafen for imaginærdelen svarer til en diffusionslængde på cirka 2.3 og kunne derfor godt skyldes den adiabatiske rand. Det er dog svært at vurdere disse randeffekter for den tre-dimensionale

løsning, idet der godt kan strømme varme fra det ene domæne til det andet, uden om varmepladen.

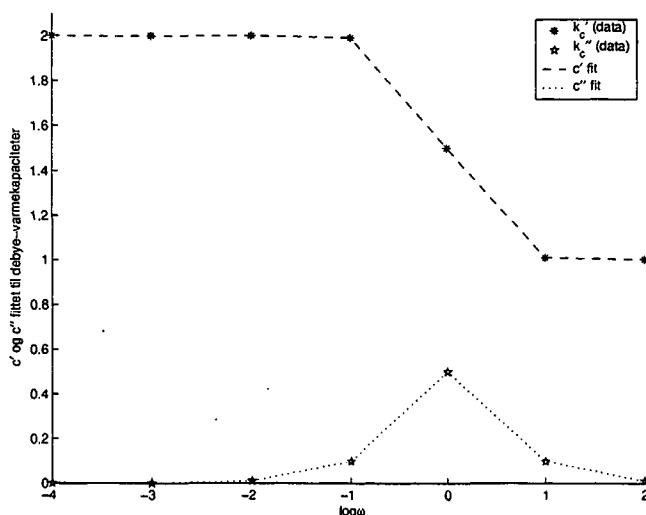
Fasen viser ligeledes at det er den isoterme rand der dominerer, da den går mod 0 for frekvensen gående mod 0.

6.5 Fit af varmekapacitet

De følgende tre figurer er resultater af et fit af varmekapaciteten til de numerisk beregnede Debye-varmekapaciteter, der dannede udgangspunkt for test af konvergens. Denne fittemetode er på ingen måde 'klar til brug' og skal nærmest opfattes som en indledende undersøgelse. Jeg vil kort forklare hvordan resultaterne er fremkommet.

For hver frekvens ω udregnes admittansen numerisk for det tilhørende $k_c(\omega)$, der er givet ved ligning 6.3.4. Denne numerisk udregnede admittans bruges som 'data' som jeg ved hjælp af fitterutinen vil forsøge at genskabe.

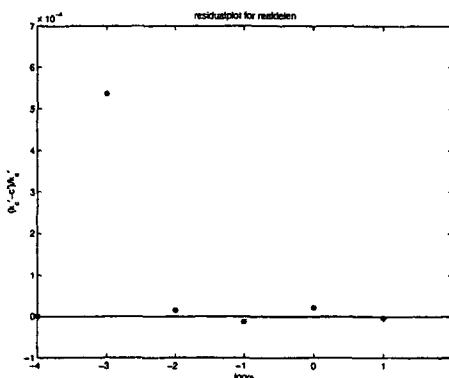
Nu sættes $c_{fit} = a + ib$ og Y_{fit} findes numerisk, ved hjælp af Femlab, for denne værdi af c_{fit} . Dette bruges til i Matlab at minimere $|Y - Y_{fit}|^2$, som funktion af a og b , ved hjælp af Matlab-funktionen fminsearch. For hver evaluering af $|Y - Y_{fit}|^2$ er der altså foregået en numerisk løsning af differentialligningen, hvilket gør proceduren tidskrævende. Dette gøres for hver frekvens. Disse fit, for resultaterne af kørsel 1 (med det groveste gitter), er vist i figur 6.11.



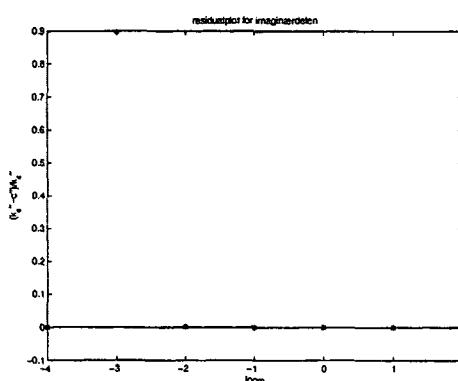
Figur 6.11 Fit til Debye-varmekapaciteter.

Det ser jo umiddelbart meget godt ud. I figur 6.12 og 6.13 er vist residualplot, hvilket bedre illustrerer hvor godt fitterutinen har kunnet genskabe k_c . Residualplottene

viser de relative afvigelser fra de 'ægte' størrelser.



Figur 6.12 Residualplot for realdelen af den fittede varmekapacitet.



Figur 6.13 Residualplot for imaginærdelen af den fittede varmekapacitet

Det ser bedst ud for realdelen; de relative afvigelser er små og nogenlunde tilfældigt fordelt omkring 0. For imaginærdelen ser det mere mærkeligt ud, der er en meget stor afvigelse ved frekvensen 10^{-3} . Jeg har prøvet at køre fitterutinen for forskellige startværdier og der ser ud til hver gang at være de samme problemer med at fitte imaginærdelen. Det lykkes ikke bedre for de kørsler hvor gitteret er gjort finere.

Hvis denne metode skal kunne bruges kræver det nok et mere systematisk arbejde, med en lidt mere kompliceret fitterutine. Det ligger imidlertid udenfor rammerne af dette projekt, hvorfor jeg vil forlade denne undersøgelse.

Hermed slutter undersøgelsen af det termiske randeffektproblem.

7 Numerisk løsning af det koblede problem

I dette kapitel vil jeg behandle det koblede problem. Først skal ligningssystemet formuleres dimensionsløst, så der for det første indgår så få parametre som muligt, og for det andet så de parametre, der indgår på en eller anden måde er karakteristiske for problemet. Dette gøres generelt, det vil sige uden indskrænkning til to dimensioner.

Herefter præsenteres den modellerede to-dimensionale geometri. Inden jeg går over til at løse det to-dimensionale problem numerisk, vil jeg først sikre mig, at Femlabs én-dimensionale numeriske løsning er i overensstemmelse med den analytiske.

Fra (Christensen & Olsen, 1997) ved vi at det én-dimensionale koblede problem har løsningen

$$Y(\omega) = \sqrt{-i\omega c_l \lambda} \quad \text{for } l_D \ll L, \quad (1)$$

der altså er den samme som for det rent termiske problem, med den forskel at det her er c_l , den longitudinale varmekapacitet, der indgår. Denne vil jeg komme tilbage til senere.

7.1 Ligningssystemet reduceres

Før man giver sig i kast med at prøve at løse det koblede problem numerisk kan det betale sig at overveje, hvordan man formulerer ligningssystemet, således at de parametre, der indgår på en eller anden måde bliver relevante for løsningen. De ligninger, der skal løses for det koblede problem, blev formuleret i ligning 4.5.1 og 4.5.3. De gengives her:

$$\begin{aligned} G \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega + \left(\frac{1}{3} G + K_T \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) &= \beta_V \nabla T_\omega \\ -i\omega c_V T_\omega - i\omega \beta_V T_0 (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) &= \nabla \cdot \nabla T_\omega, \end{aligned} \quad (7.1.1)$$

hvor det er implicit, at T_ω og \mathbf{u}_ω afhænger af stedkoordinaterne (x, y, z) og at de indgående responsfunktioner kan være frekvensafhængige.

Ligningssystemet kan forsimples ved at indføre dimensionsløse størrelser i stedet for temperaturen T og rumkoordinaterne (x, y, z) . Temperaturen er i udledningen

af ligningerne defineret som temperaturamplituden δT . Nu sættes T' lig med T i forhold til referencetemperaturen T_0 , $T'_\omega = \frac{T_\omega}{T_0} = \frac{\delta T}{T_0}$. Endvidere sættes $x' = \frac{x}{a}$ og $y' = \frac{y}{a}$, hvor a er en karakteristisk længde for den betragtede opstilling/system, det kunne for eksempel være længden af varmepladen. Så fås

$$\begin{aligned} \frac{G}{a^2} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega + \frac{\left(\frac{1}{3}G + K_T\right)}{a^2} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) &= \frac{T_0 \beta_V}{a} \nabla T'_\omega \\ -i\omega c_V T_0 T'_\omega - i\omega \frac{\beta_V T_0}{a} (\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) &= \frac{\lambda T_0}{a^2} \nabla \cdot \nabla T'_\omega. \end{aligned} \quad (7.1.2)$$

Nu gøres forskydningsfeltet dimensionsløst ved at sætte $\mathbf{u}'_\omega = \frac{K_T + \frac{4}{3}G}{a T_0 \beta_V} \mathbf{u}_\omega$. Denne transformation er motiveret af, at vi gerne vil have c_l til at indgå i det reducerede ligningssystem. Det vil sige $\mathbf{u}_\omega = \frac{a T_0 \beta_V}{K_T + \frac{4}{3}G} \mathbf{u}'_\omega$ indsættes i ligning 7.1.2, hvilket giver:

$$\begin{aligned} \frac{T_0 \beta_V}{a} \frac{G}{(K_T + \frac{4}{3}G)} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}'_\omega + \frac{T_0 \beta_V}{a} \frac{\left(\frac{1}{3}G + K_T\right)}{(K_T + \frac{4}{3}G)} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega) &= \frac{T_0 \beta_V}{a} \nabla T'_\omega \\ -i\omega c_V T_0 T'_\omega - i\omega \frac{\beta_V^2 T_0^2}{(K_T + \frac{4}{3}G)} (\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega) &= \frac{\lambda T_0}{a^2} \nabla \cdot \nabla T'_\omega. \end{aligned} \quad (7.1.3)$$

Ved at forkorte bevægelsesligningen med $\frac{T_0 \beta_V}{a}$ og diffusionsligningen med T_0 fås

$$\begin{aligned} \frac{G}{(K_T + \frac{4}{3}G)} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}'_\omega + \frac{\left(\frac{1}{3}G + K_T\right)}{(K_T + \frac{4}{3}G)} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega) &= \nabla T'_\omega \\ -i\omega c_V T'_\omega - i\omega \frac{\beta_V^2 T_0}{(K_T + \frac{4}{3}G)} (\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega) &= \frac{\lambda}{a^2} \nabla \cdot \nabla T'_\omega. \end{aligned} \quad (7.1.4)$$

Nu indføres den såkaldte longitudinale varmekapacitet c_l , der defineres som $c_l = \frac{K_S + \frac{4}{3}G}{K_T + \frac{4}{3}G} c_V$, hvor K_S er det adiabatiske bulkmodul. Ved hjælp af termodynamiske relationer kan vi skrive c_l på formen $c_l = c_V + \frac{T_0 \beta_V^2}{(K_T + \frac{4}{3}G)}$. Skrives endelig $(K_T + \frac{4}{3}G)$ som M_T , der er det såkaldte longitudinale isoterm modul, kan ligningerne skrives som

$$\begin{aligned} \frac{G}{M_T} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}'_\omega + \left(1 - \frac{G}{M_T}\right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega) &= \nabla T'_\omega \\ -i\omega T'_\omega - i\omega \frac{(c_l - c_V)}{c_V} (\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega) &= \frac{\lambda}{c_V a^2} \nabla \cdot \nabla T'_\omega, \end{aligned} \quad (7.1.5)$$

hvor diffusionsligningen endvidere er divideret igennem med c_V .

Vi vil nu gerne indføre de karakteristiske størrelser $k_{||}$, k_{\perp} , k_l og γ^* . $k_{||}$ og k_{\perp} er mekaniske bølgevektorer, henholdsvis den longitudinale og den transversale, og disse er defineret på følgende måde

$$k_{||}^2 = \frac{\omega^2 \rho}{M_S} = \frac{\omega^2 \rho}{K_S + \frac{4}{3}G} = \frac{\omega^2}{v_l^2} \quad \text{og} \quad k_{\perp}^2 = \frac{\omega^2 \rho}{G} = \frac{\omega^2}{v_T^2} \quad (7.1.6)$$

(Sommerfeld, 1950), hvor M_S er det adiabatiske longitudinale modul, ρ som sædvanlig er masseylden og v_l og v_T betegner propagationshastigheden af henholdsvis den longitudinale og den transversale bølge. Forholdet mellem de to bølgevektorer er altså

$$\frac{k_{\parallel}^2}{k_{\perp}^2} = \frac{G}{M_S}. \quad (7.1.7)$$

Endvidere defineres en konstant γ^* som forholdet mellem c_l og c_V ,

$$\gamma^* = \frac{c_l}{c_V} = \frac{M_S}{M_T}. \quad (7.1.8)$$

Endelig defineres analog med afsnit 5 og 6 en termisk bølgevektor $k_t^2 = \frac{i\omega c_l a^2}{\lambda}$, hvori varmekapaciteten c_l indgår.

Nu skrives ligningssystemet om så størrelserne k_t , γ^* og $\frac{k_{\parallel}^2}{k_{\perp}^2}$ indgår:

$$\begin{aligned} \gamma^* \frac{k_{\parallel}}{k_{\perp}} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}'_{\omega} + (1 - \gamma^* \frac{k_{\parallel}}{k_{\perp}}) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}'_{\omega}) &= \nabla T'_{\omega} \\ -T'_{\omega} - (\gamma^* - 1) (\nabla \cdot \mathbf{u}'_{\omega}) &= \frac{\gamma^*}{k_t^2} \nabla \cdot \nabla T'_{\omega}. \end{aligned} \quad (7.1.9)$$

Parametrene i dette ligningssystem er karakteristiske for det koblede problem (Christensen, 2002). Løses ligningssystemet numerisk for en given geometri, med givne randbetingelser på T_{ω} og \mathbf{u}_{ω} fås altså en løsning der afhænger af disse karakteristiske størrelser $T_{\omega}(k_t, \gamma^*, \frac{k_{\parallel}^2}{k_{\perp}^2})$.

7.1.1 Ligningssystemet uden kobling

Der er altså nu tre involverede varmekapaciteter c_l , c_V og c_p . Om disse gælder helt generelt $c_p \geq c_l \geq c_V$. Dette kan indses idet varmekapaciteten er et mål for hvor meget energi man skal tilføre et stof for at få temperaturen til at stige. I en isobar situation skal der tilføres mest energi, idet en temperaturstigning må medføre en udvidelse, for at forhindre at trykket ændrer sig. For at kunne lave denne udvidelse skal der udføres et arbejde. Den longitudinale varmekapacitet beskriver en situation hvor stoffet kun kan udvide sig på langs, det vil sige her skal også bruges energi på at udføre et arbejde, men ikke lige så meget som i den isobare situation. I en isokor situation bliver intet energi brugt til udvidelse, det vil sige denne varmekapacitet må være den mindste af de tre. Denne relation kan selvfølgelig også ses af følgende sammenhænge:

$$\begin{aligned} c_l &= \frac{M_S}{M_T} c_V = \frac{K_s + \frac{4}{3}G}{K_T + \frac{4}{3}G} c_V \\ c_p &= \frac{K_s}{K_T} c_V. \end{aligned}$$

Ved hjælp af termodynamiske relationer finder man endvidere at der gælder:

$$c_p - c_V = T_0 \alpha_p^2 K_T$$

og

$$c_l - c_V = \frac{T_0 \alpha_p^2 K_T^2}{M_T}.$$

Som beskrevet i afsnit 4.6 er der to forskellige tilfælde, hvor det termiske respons ikke afhænger af det mekaniske og hvor det giver mening at tale om en isobar situation, nemlig for tyndtflydende væsker og faste stoffer.

Væske

Ved hjælp af relationerne ovenfor kan vi se at der for en tyndtflydende væske, hvor $G \approx 0$, gælder:

$$c_p = c_l \neq c_V,$$

det vil sige at γ^* defineret ovenfor reducerer til $\gamma = \frac{c_p}{c_V}$ kendt fra termodynamik.

Som beskrevet i afsnit 4.6 gælder for en isobar proces $\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega = \frac{\beta_\nu}{K_T} T_\omega$, hvilket i de reducerede variable svarer til $\nabla \cdot \mathbf{u}'_\omega = T'_\omega$. Ved indsættelse i ligningssystemet 7.1.9 fås diffusionsligningen i dette tilfælde:

$$-k_t^2 T'_\omega = \nabla \cdot \nabla T'_\omega. \quad (7.1.10)$$

Faste stoffer

For faste stoffer, hvor $\alpha_p \approx 0$ fås:

$$c_p = c_l = c_V,$$

det vil sige at $\gamma^* = \gamma = \frac{c_p}{c_V} = 1$.

Igen fås den ukoblede diffusionsligning:

$$-k_t^2 T'_\omega = \nabla \cdot \nabla T'_\omega. \quad (7.1.11)$$

7.2 Den modellerede geometri

Det er altså ligningssystemet 7.1.9 vi gerne vil have løst. Det ville selvfølgelig være nyttigt at kunne løse det koblede problem for en tre-dimensional geometri, som for eksempel opstillingen beskrevet i kapitel 6. Dette er der dog flere problemer forbundet med. Der er en rent praktisk begrænsning, idet den numeriske løsning af dette problem kræver for meget computerhukommelse og i øvrigt også, hvis man

har hukommelse nok, vil tage lang tid. Derudover vil det termiske randeffektproblem beskrevet i kapitel 6 selvfølgelig stadig være på spil, hvilket må gøre tolknningen af resultatet mere kompliceret. For at kunne vurdere den 'rene' effekt af den termoviskoelastiske kobling har jeg derfor valgt at kigge på en simplere geometri.

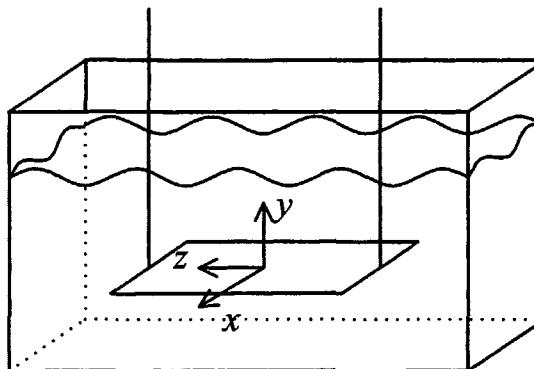
Jeg har valgt at løse det koblede problem i en to-dimensional geometri, hvor der endvidere ses bort fra substratet som varmefilmen sidder på. Dette er en højst idealiseret situation, der kun er tættere på 'virkeligheden' end den én-dimensionale analytiske løsning på grund af den ekstra dimension. Udover den ovenfor nævnte grund er der imidlertid yderligere to grunde til at det kan være interessant at løse det koblede problem i denne geometri.

Den første grund er at undersøge om der overhovedet er et frekvens-område, hvor den én-dimensionale analytiske løsning til det koblede problem er en god approksimation. Som beskrevet i kapitel 5 er den én-dimensionale analytiske løsning for det rent termiske problem en god approksimation til tre-dimensionale løsninger, sålænge frekvensen er stor nok til at $l_D \ll a$, for en karakteristisk længde a . Dette skyldes at de termiske bølger er diffusive, det vil sige dæmpede. De mekaniske bølger er imidlertid ikke på samme måde dæmpede. Om en bølge er dæmpet eller ej afhænger af dispersionsrelationens udseende. Hvis k har lige stor real- og imaginærdel vil bølgen være diffusiv, mens den vil være propagerende hvis k er ren reel.

For en væske, hvor $G = -i\omega\eta$, vil de transversale mekaniske bølger altså være diffuse, idet k_\perp^2 ifølge 7.1.6 bliver ren imaginær og k_\perp dermed har lige stor real- og imaginærdel. I en glas vil de transversale mekaniske bølger være propagerende idet der her gælder $G = G_\infty$. Longitudinale bølger er stort set propagerende, dog med en lille diffusiv del på grund af G . Selvom de mekaniske bølger således både er diffuse og propagerende viser det sig at de mekaniske bølgevektorer k er meget små, sammenlignet med den termiske bølgevektor, svarende til at de mekaniske bølgelængder er meget længere end den termiske. Man kan derfor tillade sig at betragte situationen som om de mekaniske bølger overhovedet ikke er dæmpede, på de længdeskalaer vi betragter. Når de ikke er dæmpede kan man altså ikke forvente at der vil være et område, hvor den én-dimensionale beskrivelse er en god approksimation.

Den anden grund er at man godt kan forestille sig en eksperimentel opstilling, der meningsfuldt kan modelleres med en to-dimensional geometri. (Birge et al., 1997) benytter en eksperimentel opstilling hvor en aflang rektangulær varmeplade nedsænkes i væsken. I en sådan situation kan man antage at varmeudbredelse i og deformation af væsken kun sker i to dimensioner, nemlig i retningen vinkelret på pladen (y) og langs den korte led af pladen (x), se figur 7.1.

At varmeudbredelsen kun sker i to dimensioner er en god approksimation når den termiske bølgelængde er lille i forhold til pladens lange side (z -retningen). Er den det vil de diffuse termiske bølger dø ud inden de når at 'mærke' denne rand. Den mekaniske bølge er som beskrevet ikke dæmpet, så der vil i principippet være defor-



Figur 7.1 En skitse af en opstilling med en aflang rektangulær varmeplade, $x \ll z$.

mation i alle tre retninger. Men da væsken skal udvide sig mod inertien af pladen langs hele den betragtede retning, vil z -retningen være den mest arbejdskrævende retning. Det vil altså være meget sværere for væsken at udvide sig i z -retningen, end i de to andre retninger, og deformationen vil derfor være størst i de to retninger x og y . Den approksimation man laver når man antager at deformationen kun sker i to dimensioner er altså bedre jo mere aflang varmepladen er. Dette gælder sålænge væsken udvider sig meget mere end varmepladen.

7.3 Løsning af det koblede problem i én dimension i Femlab

Som i afsnit 5 løses det koblede problem først numerisk i én dimension. Dette gøres igen for at sammenligne med analytiske løsninger og dermed kontrollere pålideligheden af de numeriske løsninger.

Den analytiske løsning for adiabatiske termiske randbetingelser og clampede mekaniske randbetingelser er givet ved

$$Y(\omega) \approx \sqrt{-i\omega c_l \lambda} \approx (1 - i) \sqrt{\frac{\omega c_l \lambda}{2}} \quad \text{for } l_D \ll L \quad (7.3.1)$$

$$Y(\omega) \approx -i\omega L c_V \quad \text{for } l_D \gg L \quad (7.3.2)$$

(Christensen & Olsen, 1997), hvor L er længden af geometrien og man skal være opmærksom på at det er den longitudinale varmekapacitet der indgår i det højfrekvente udtryk og c_V der indgår i det lavfrekvente udtryk.

7.3.1 Ligningerne og randbetingelserne

Vi skal nu have ligningssystemet formuleret i én dimension og på en for Femlab spiselig måde. Selvom ligningerne 7.1.9 kan siges at være mere karakteristisk for problemet vælger jeg alligevel her at tage udgangspunkt i ligningerne 7.1.5, idet de minder mere om formuleringen af det termiske randeffektproblem. Ligningerne 7.1.5 bliver i én dimension:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u_\omega}{\partial x^2} &= \frac{\partial T_\omega}{\partial x} \\ -i\omega T_\omega - i\omega(\gamma^* - 1) \frac{\partial u_\omega}{\partial x} &= \frac{\lambda}{c_V a^2} \frac{\partial^2 T_\omega}{\partial x^2}.\end{aligned}\quad (7.3.3)$$

Her lægger man mærke til, at det mekaniske forhold $\frac{G}{M_T}$ ikke længere indgår eksplícit i ligningssystemet. Det longitudinale modul M_T og dermed de mekaniske responsfunktioner G og K_T indgår dog i c_l og indgår derfor implicit i systemet.

Ligningerne løses i et domæne der løber fra $x = 0$, hvor varmekilden sidder, til $x = L$. De termiske randbettingelser sættes til adiabatiske i $x = L$ og i $x = 0$ specificeres varmestrømmen (pr. $c_V a^2$):

$$\frac{j_{Q,\omega}(0)}{c_V a^2} = -\frac{\lambda}{c_V a^2} \frac{\partial T_\omega}{\partial x}|_{x=0} = 1. \quad (7.3.4)$$

Grunden til at varmestrømmen bestemmes i forhold til $c_V a^2$ skyldes opstillingsmæssige årsager i Femlab, samt formuleringen af ligningssystemet 7.3.3.

De mekaniske randbettingelser sættes til clampede, det vil sige at der ikke er nogen deformationer på randene:

$$u_\omega(0) = u_\omega(L) = 0. \quad (7.3.5)$$

7.3.2 Den termiske admittans

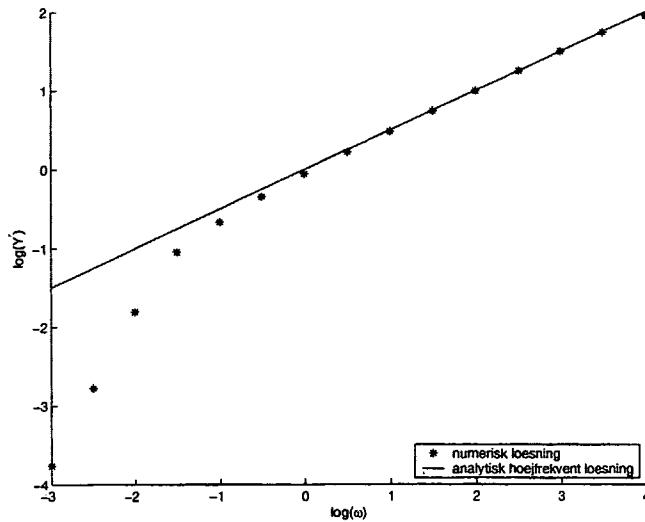
Nu sættes $\gamma^* = 2$, $a = 1$, $L = 8$ og $\frac{\lambda}{c_V} = 1$, hvilket betyder at diffusionslængden bliver:

$$l_D = \frac{1}{Re(k_t)} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\omega c_l a^2}} = \sqrt{\frac{2\lambda}{\omega \gamma^* c_V a^2}} = \frac{1}{\sqrt{\omega}},$$

svarende til at $\log \omega = 0$ er den frekvens hvor $l_D = 1 = a$. Gitteret genereres, hvorefter ligningerne kan løses numerisk. Dette gøres for ω logaritmisk fordelt mellem 10^{-3} og 10^4 . Den termiske admittans findes som

$$Y_{num}(\omega) = \frac{j_{Q,\omega}(0)}{T_\omega(0)} = \frac{1}{T_\omega(0)} = \frac{T'_\omega(0) - iT''_\omega(0)}{T'^2_\omega(0) + T''^2_\omega(0)}, \quad (7.3.6)$$

hvor T'_ω som sædvanlig er realdelen og T''_ω er imaginærdelen af temperaturen og Y_{num} betegner den numerisk bestemte admittans per areal. I figur 7.2 er logaritmen



Figur 7.2 Et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans, fundet ved løsning af ligningerne 7.3.3 med adiabatiske termiske randbetingelser og clampede mekaniske randbetingelser. ω går fra 10^{-3} til 10^4 og $\gamma^* = 2$, $a = 1$, $L = 8$ og $\frac{\lambda}{c_V} = 1$. Realdelen af den analytiske løsning for høje frekvenser (ligning 7.3.1) er plottet med den fuldt optrukne linje.

til realdelen af admittansen plottet mod logaritmen til frekvensen for den numeriske løsning, og for den analytiske højfrekvente approksimation (ligning 7.3.1):

$$Y'(\omega) = \sqrt{\frac{\omega c_l \lambda}{2}} = \sqrt{\frac{\omega \gamma^* c_V^2}{2}} = \sqrt{\omega}, \quad (7.3.7)$$

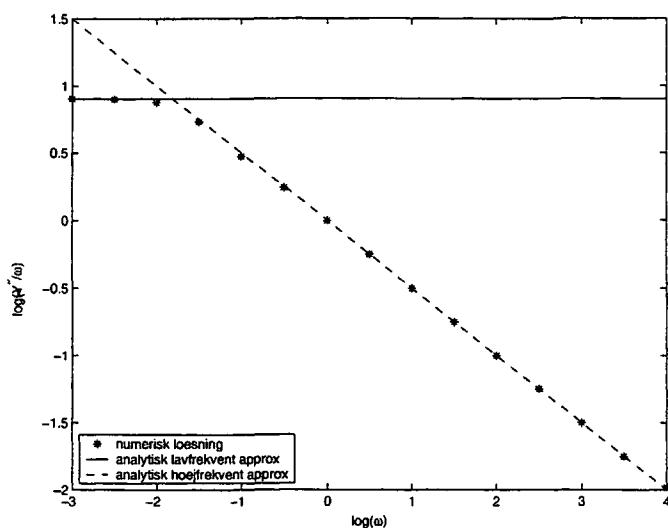
hvor andet lighedstegn opnås, idet $c_l = \gamma^* c_V$ og $\frac{\lambda}{c_V}$ er sat til 1. Tredje lighedstegn fremkommer idet $j_{Q,\omega}(0) = c_V a^2$ (jævnfør ligning 7.3.4), a^2 er sat til 1, $j_{Q,\omega}(0)$ er sat til 1 i udregningen af den numeriske termiske admittans (ligning 7.3.6), hvorved der fås $c_V = 1$. Endelig havde vi $\gamma^* = 2$.

Det ses at den numeriske løsning er fint i overensstemmelse med den analytiske approksimation for frekvenser større end 10, samt at realdelen af den numeriske admittans går mod 0 for ω gående mod 0, som den skal.

I figur 7.3 er logaritmen til minus imaginærdenen af admittansen over frekvensen ($\log(-\frac{Y''_{num}(\omega)}{\omega})$) plottet mod logaritmen til frekvensen for den numeriske løsning, samt for den højfrekvente og lavfrekvente analytiske løsning (ligning 7.3.1 og 7.3.2). Den lavfrekvente er givet ved:

$$Y''(\omega) = -\omega L c_V = -8\omega \Rightarrow \log\left(-\frac{Y''(\omega)}{\omega}\right) = \log(8) \approx 0.9, \quad (7.3.8)$$

Her ses at den lavfrekvente analytiske løsning er god for $\log \omega \leq -2.5$.



Figur 7.3 Et logaritmisk plot af minus imaginærdelen af den termiske admittans, divideret med ω , fundet ved løsning af ligningerne 7.3.3 med adiabatiske termiske randbetingelser og clampede mekaniske randbetingelser. ω går fra 10^{-3} til 10^4 og $\gamma^* = 2$, $a = 1$, $L = 8$ og $\frac{\lambda}{c\rho} = 1$. Imaginærdelen af den analytiske løsning for lave frekvenser (ligning 7.3.2) er plottet med den fuldt optrukne linje.

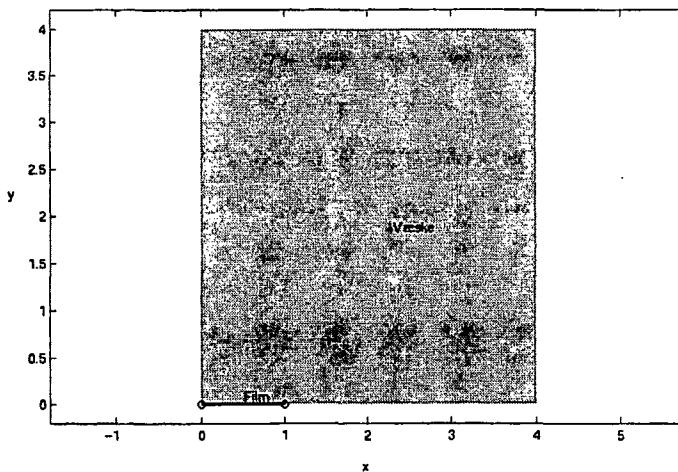
Vi kan altså konkludere at Femlab er i stand til at reproducere de analytiske løsninger i en én-dimensional situation, hvilket øger pålideligheden af de to-dimensionale numeriske løsninger.

7.4 Opstilling af to-dimensional model i Femlab

Jeg vil nu beskrive opstillingen af den to-dimensionale model i Femlab. Først beskrives geometrien, der skal repræsentere geometrien beskrevet i figur 7.1, herefter kommenteres hvordan ligningerne og randbetingelserne formuleres i Femlab og til sidst vises de opnåede løsninger.

7.4.1 Geometrien

Den geometri jeg benytter repræsenterer et to-dimensionalt snit af geometrien i figur 7.1 i (x, y) planen, for $z = 0$. Varmepladen modelleres, som for det termiske randeffektproblem, som en plade uden tykkelse, det vil sige i to dimensioner bliver den til en linje uden tykkelse. Hermed kan varmestrømmen ud i væsken repræsenteres som en randbetingelse på denne linje. På grund af geometriens symmetri, kan man nøjes med at kigge på en fjerdedel af planen, se figur 7.4. Jeg har valgt at sætte længden af varmepladen på figur 7.4 til 1, dette svarer altså til at længden af



Figur 7.4 Figuren viser den geometri, som det koblede problem løses for.

varmepladen i x -retningen på figur 7.1 er 2. Kassens halve dybde og halve højde er sat til 4.

7.4.2 Ligningerne

Som i det én-dimensionale tilfælde tager jeg også her udgangspunkt i ligningssystemet 7.1.5. Jeg antager at $\mathbf{u}_\omega = (u_{x,\omega}(x,y), u_{y,\omega}(x,y))$ og $T_\omega = T_\omega(x,y)$. Dermed bliver alle afledte med hensyn til z lig 0, hvilket reducerer ligningssystemet til tre ligninger:

$$\begin{aligned} \frac{G}{M_T} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega + \left(1 - \frac{G}{M_T}\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) &= \nabla T_\omega \\ -i\omega T_\omega - i\omega(\gamma^* - 1)(\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega) &= \frac{\lambda}{c_V} \nabla \cdot \nabla T_\omega, \end{aligned} \quad (7.4.1)$$

hvor alle vektoroperatorer (for eksempel $(\nabla \cdot)$ og ∇) nu skal opfattes som 'to-dimensionale' operatorer, der fremkommer ved at alle led, der indeholder z eller afledte med hensyn til z , sættes lig 0. I ligningerne er a endvidere sat til 1 og γ^* er indført. I dette ligningssystem indgår i principippet tre frekvensafhængige størrelser, nemlig $\frac{G}{M_T}$, γ^* og $\frac{\lambda}{c_V}$.

Disse ligninger skal nu implementeres i Femlab. Femlab har et antal prædefinerede ligninger, hvor man kun behøver at specificere de indgående parametre, som for eksempel Helmholtz' ligning, som jeg benyttede i kapitel 6. De koblede ligninger passer imidlertid ikke rigtig med nogen af disse. Derfor benyttes her et mere generelt 'mode'. Ligningerne skal dog stadigvæk formuleres på en bestemt måde for at passe ind. Ligningerne skal skrives på formen:

$$\nabla \cdot \Gamma = F, \quad (7.4.2)$$

hvor formuleringen af Γ og F afhænger af de specifikke ligninger. Diffusionsligningen formuleres for sig selv, som en ligning på formen 7.4.2, og bevægelseslignerne formuleres som et ligningssystem også på formen 7.4.2.

Diffusionsligningen

For diffusionsligningen er

$$\Gamma = \frac{\lambda}{c_V} \nabla T_\omega \quad \text{og} \quad F = -i\omega T_\omega - i\omega(\gamma^* - 1)(\nabla \cdot \mathbf{u}_\omega). \quad (7.4.3)$$

Bevægelseslignerne

Bevægelseslignerne skrives lidt om inden de implementeres. Vektorregnereglen, som vi lidt uformelt kan kalde 'grad-div=Laplace+curl-curl', bruges på andet led hvorved ligningen i 7.4.1 bliver til:

$$\nabla \cdot \nabla \mathbf{u}_\omega + \left(1 - \frac{G}{M_T}\right) \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_\omega) = \nabla T_\omega. \quad (7.4.4)$$

Således fås for bevægelseslignerne

$$\Gamma = (\nabla u_{x,\omega}, \nabla u_{y,\omega}) \quad \text{og} \quad F = \nabla T_\omega - \left(1 - \frac{G}{M_T}\right) \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_\omega), \quad (7.4.5)$$

hvor F her er en vektor og $\nabla \cdot \Gamma$ i ligning 7.4.2 også bliver en vektor, idet divergensoperatoren i dette tilfælde er 'vektoren' (∇_x, ∇_y) , det vil sige der fås $\nabla \cdot \Gamma = (\nabla \cdot \nabla u_{x,\omega}, \nabla \cdot \nabla u_{y,\omega})$.

Formuleringen af bevægelseslignerne i Femlab er bestemt af at Laplace-operatoren er tvunget til at indgå. Herudover kan man (ved at bruge vektorregnereglen) vælge om man vil have 'curl-curl' eller 'grad-div' til at indgå. Jeg har prøvet begge dele og det viste sig at Femlab bedst kunne håndtere den ovenfor beskrevne formulering.

7.4.3 Randbettingelserne

Som med ligningerne skal randbettingelserne også skrives på en bestemt form for at kunne implementeres i Femlab. På hver rand skal randbettingelsen skrives på formen

$$-n_j \Gamma_{lj} = G_l + \frac{\partial R_m}{\partial n_l} \mu_m, \quad R_m = 0 \quad \text{på} \quad \partial\Omega, \quad (7.4.6)$$

hvor l løber fra 1 til n , der er antallet af afhængige variable, j er komponenterne i normalvektoren til den betragtede rand \mathbf{n} , der altså har samme dimension som den betragtede geometri og m er antallet af bånd på systemet. Normalvektoren er

defineret således at den peger fra randen 'ind i' geometrien. v_l er den l'te afhængige variabel og μ 'erne er såkaldte Lagrangske multiplikatorer. Denne formulering af randbetingelserne bruges både til Neumann og Dirichlet betingelser. (*Femlab Reference Manual*, n.d.)

Diffusionsligningen

De termiske randbetingelser specificeres som adiabatiske på alle rande og med en varmestrøm ind i systemet på den rand, der repræsenterer varmefilmen, se figur 7.4. R_m sættes derfor til 0 på alle rande, hvorved den anden betingelse i 7.4.6 bliver tom ($0=0$) og den første betingelse bliver til en Neumann betingelse. Lad os først kigge på varmefilmen. Da Γ er defineret i ligningen 7.4.3 som $\Gamma = \frac{\lambda}{c_V} \nabla T_\omega$ fås

$$-\mathbf{n} \cdot \frac{\lambda}{c_V} \nabla T_\omega = -\frac{j_{Q,\omega}}{c_V} = G \quad \text{på filmen,} \quad (7.4.7)$$

hvor $j_{Q,\omega}$ er varmestrømmen ind i systemet per areal. Man skal huske at G her ikke er shearmodulet, men Femlabs notation for randbetingelsen. Jeg vælger at sætte G til $-1(\frac{\text{Længde Temperatur}}{\text{tid}})$, svarende til en strøm ind i systemet. Således er c_V altså nu bundet til at have samme størrelse som varmestrømmen. Dette svarer dog blot til en dimensionering af systemet og har ingen fysisk betydning. På alle andre rande sættes G til 0, hvilket altså betyder at

$$j_{Q,\omega} = 0 \quad \text{på alle andre rande.} \quad (7.4.8)$$

Bevægelsesligningerne

De mekaniske randbetingelser sættes til clampede på alle ydre rande. Dette gøres ved at sætte $R_1 = u_{x,\omega}$ og $R_2 = u_{y,\omega}$, hvorved man får Dirichlet betingelsen

$$u_{x,\omega} = 0, \quad u_{y,\omega} = 0 \quad \text{på alle ydre rande.} \quad (7.4.9)$$

De indre rande er et udtryk for symmetrien i geometrien, det vil sige der skal ikke kunne ske forskydninger på tværs af de indre rande, men der skal kunne ske forskydninger på langs af de indre rande. Dette giver for den indre rand parallelt med y -aksen:

$$u_{x,\omega} = 0, \quad (7.4.10)$$

mens der for den indre rand parallelt med x -aksen gælder:

$$u_{y,\omega} = 0. \quad (7.4.11)$$

De første betingelser i 7.4.6 bliver tomme på grund af μ 'ernes egenskaber (*Femlab Reference Manual*, n.d.).

7.4.4 Resultater

Nedenfor vises resultaterne for nogle forskelligt valgte værdier af $\frac{\lambda}{c_V}$, γ^* og $\frac{G}{M_T}$.

Den numeriske termiske admittans er fundet som i afsnit 6.3:

$$Y(\omega) = \frac{j_Q(\omega) \text{film}}{T_\omega(\text{film})} = \frac{1}{T_\omega(\text{film})} = \frac{T'_\omega(\text{film}) - iT''_\omega(\text{film})}{T'^2_\omega(\text{film}) + T''^2_\omega(\text{film})}, \quad (7.4.12)$$

hvor varmestrømmen er sat til 1, det vil sige det betyder på grund af formuleringen af de termiske randbetingelser at $c_V = 1$.

I alle de viste resultater er $\frac{\lambda}{c_V} = 1$, hvilket egentlig bare svarer til en skalering af frekvensen, mens γ^* og $\frac{G}{M_T}$ varieres. Dog er der nogle bånd på disse. Der gælder $\gamma^* \geq 1$, idet $c_l \geq c_V$. Da $\frac{G}{M_T} = \frac{G}{K_T + \frac{4}{3}G}$ kan vi se at der må gælde $0 \leq \frac{G}{M_T} < \frac{3}{4}$, idet $K_T > 0$ og G også selv skal være større end 0. Vi kan imidlertid sætte en strengere begrænsning på, idet K_T typisk er mindst to-tre gange så stor som G ($G_\infty \approx 4 \text{ GPs}$ og $K_T \approx 6 - 12 \text{ GPs}$ i en glas (Christensen, 2002)). For $K_T = 2G$ fås $\frac{G}{M_T} \approx \frac{1}{3}$, det vil sige der må gælde $0 \leq \frac{G}{M_T} < \frac{1}{3}$.

Dermed bliver den én-dimensionale analytiske approksimation, formuleret i disse variable:

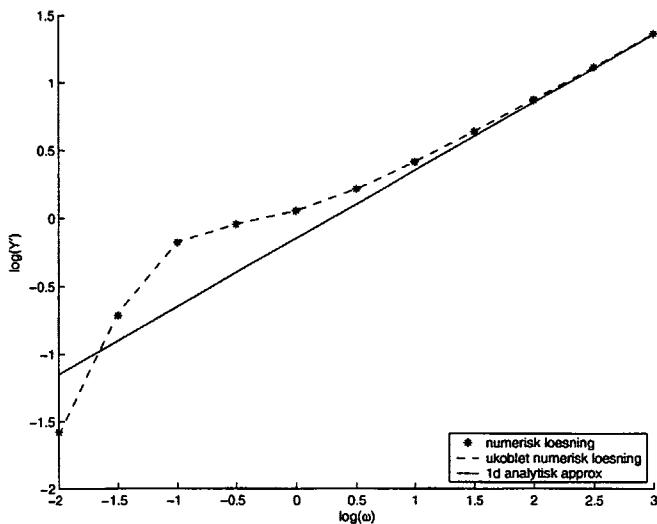
$$Y(\omega) = \sqrt{-i\omega c_l \lambda} = \sqrt{-i\omega \gamma^* c_V^2} = \sqrt{-i\omega \gamma^*} \quad \text{for } l_D \ll L. \quad (7.4.13)$$

Jeg vælger først at sætte $\frac{G}{M_T} = \frac{1}{3}$ og $\gamma^* = 1$, hvilket svarer til en situation, hvor der ikke er nogen kobling. Dette skulle gerne kunne vises for den numeriske løsning. Et logaritmisk plot af realdelen af admittansen ses i figur 7.5 og et logaritmisk plot af minus imaginærdelen, over frekvensen, for denne situation ses i figur 7.6. Her er endvidere plottet numeriske løsninger, opnået ved løsning af den 'almindelige' diffusionsligning, for den samme geometri. Disse løsninger ses at ligge oven i hinanden, det vil altså sige at den numeriske løsning kan reproducere den ukoblede situation.

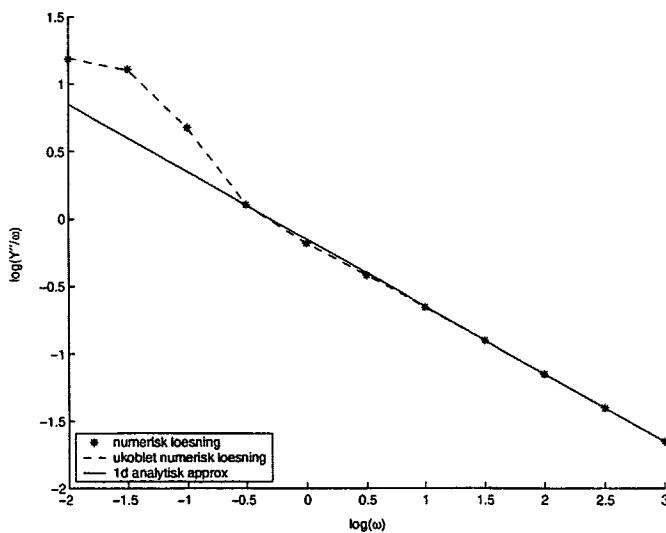
Herefter sættes $\frac{G}{M_T} = \frac{1}{4}$ og $\gamma^* = 2$, hvilket svarer til en situation, hvor der er kobling. Resultaterne for real- og imaginærdel ses i figur 7.7 og 7.8. Her er endvidere den analytiske 1d-approksimation plottet.

For denne situation har jeg endvidere undersøgt konvergensen af løsningen. Dette foregik på samme måde som i kapitel 6. Denne undersøgelse viser at løsningen er konvergeret og derfor kan betragtes som pålidelig, i hvert fald for frekvenser i området 0.01 til 100.

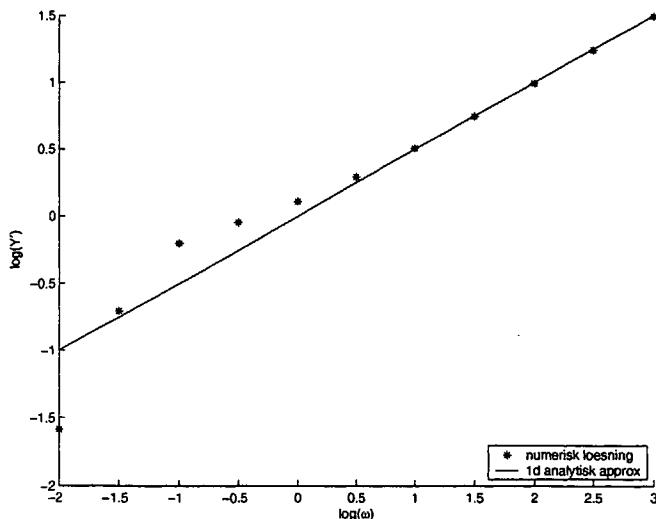
Til sidst har jeg valgt at undersøge en situation, hvor γ^* er kompleks. $\frac{G}{M_T}$ sættes til $\frac{1}{4}$ som før, mens γ^* sættes lig $(1+i)$. Resultaterne for real- og imaginærdel ses i figur 7.9 og 7.10, igen sammen med én-dimensionale løsninger.



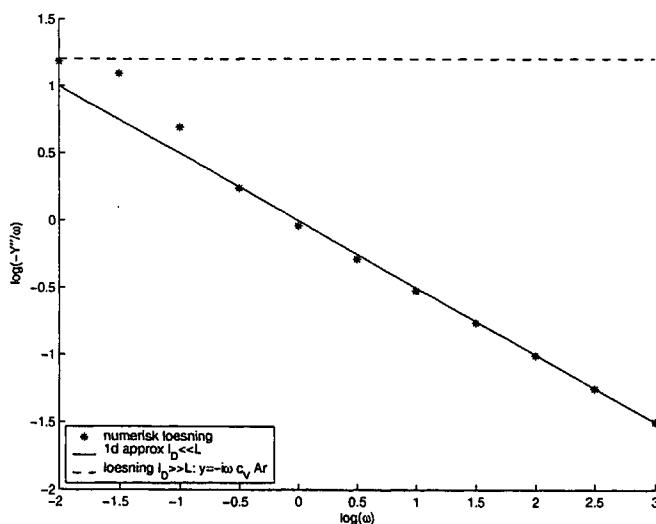
Figur 7.5 Figuren viser et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 7.4.1 med randbetingelser formuleret i afsnit 7.4.3, for ω fra 10^{-2} til 10^3 og $\gamma^* = 1$ og $\frac{G}{M_T} = 0$. Herudover er den analytiske 1d-approksimation plottet med den fuldt optrukne, og numeriske resultater fra en løsning af den almindelige, u-koblede diffusionsligning for samme geometri plottet med den stiplede linje.



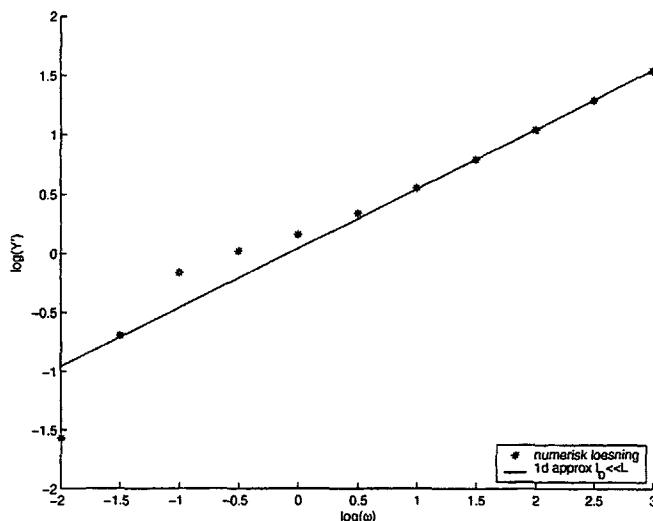
Figur 7.6 Figuren viser et logaritmisk plot af minus imaginærdelen, over frekvensen, af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 7.4.1 med randbetingelser formuleret i afsnit 7.4.3, for ω fra 10^{-2} til 10^3 og $\gamma^* = 1$ og $\frac{G}{M_T} = 0$. Herudover er den analytiske 1d-approksimation plottet med den fuldt optrukne, og numeriske resultater fra en løsning af den almindelige, u-koblede diffusionsligning for samme geometri plottet med den stiplede linje.



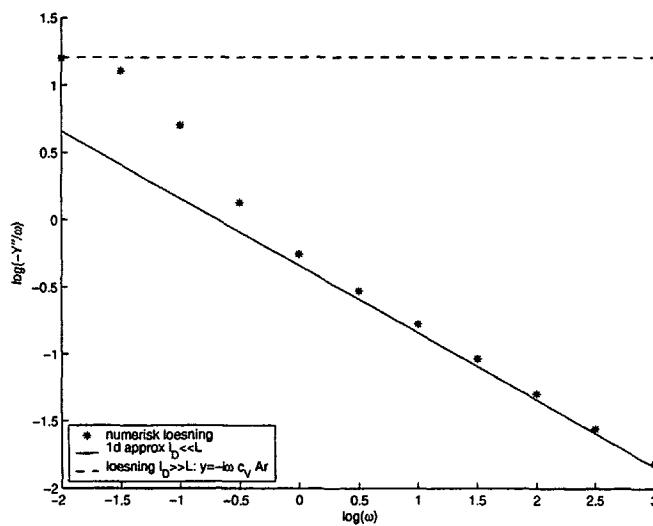
Figur 7.7 Figuren viser et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 7.4.1 med randbetingelser formuleret i afsnit 7.4.3, for ω fra 10^{-2} til 10^3 og $\gamma^* = 2$ og $\frac{G}{M_T} = \frac{1}{4}$. Herudover er den analytiske 1d-approksimation for høje frekvenser plottet med den fuldt optrukne linje.



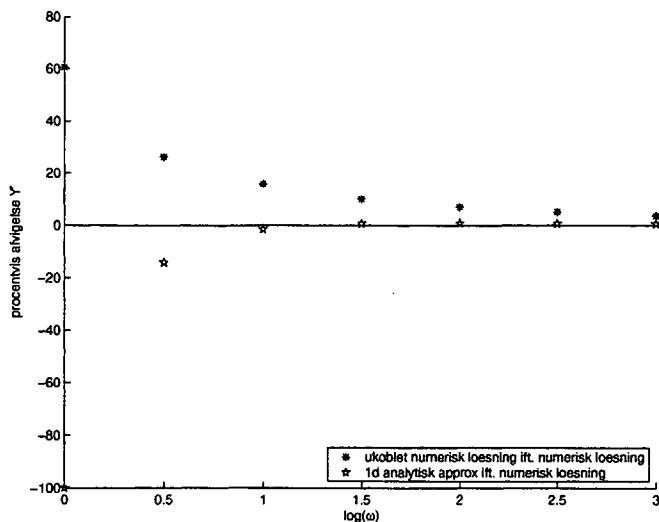
Figur 7.8 Figuren viser et logaritmisk plot af minus imaginærdelen, over frekvensen, af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 7.4.1 med randbetingelser formuleret i afsnit 7.4.3, for ω fra 10^{-2} til 10^3 og $\gamma^* = 2$ og $\frac{G}{M_T} = \frac{1}{4}$. Herudover er den analytiske 1d-approksimation for høje frekvenser plottet med den fuldt optrukne, og den analytiske 1d-approksimation for lave frekvenser plottet med den stipede linje.



Figur 7.9 Figuren viser et logaritmisk plot af realdelen af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 7.4.1 med randbetingelser formuleret i afsnit 7.4.3, for ω fra 10^{-2} til 10^3 og $\gamma^* = (1 + i)$ og $\frac{G}{M_T} = \frac{1}{4}$. Herudover er den analytiske 1d-approksimation for høje frekvenser plottet med den fuldt optrukne linje.



Figur 7.10 Figuren viser et logaritmisk plot af minus imaginærdelen, over frekvensen, af den termiske admittans fundet ved løsning af ligningerne 7.4.1 med randbetingelser formuleret i afsnit 7.4.3, for ω fra 10^{-2} til 10^3 og $\gamma^* = (1 + i)$ og $\frac{G}{M_T} = \frac{1}{4}$. Herudover er den analytiske 1d-approksimation for høje frekvenser plottet med den fuldt optrukne, og den analytiske 1d-approksimation for lave frekvenser plottet med den stiplede linje.



Figur 7.11 Figuren viser et plot af de procentvise afvigelser fra realdelen af admittansen for løsningen i figur 7.7 for henholdsvis numeriske resultater fra en løsning af den almindelige, u-koblede diffusionsligning for samme geometri og den analytiske 1d-approksimation.

I figur 7.11 er vist et plot af de procentvise afvigelser mellem realdelen af den termiske admittans for den numeriske koblede løsning (fra figur 7.7) og den koblede en-dimensionale analytiske løsning for høje frekvenser, henholdsvis den numeriske koblede løsning (fra figur 7.7) og den numeriske u-koblede løsning fundet for den samme geometri. Denne figur viser at det har en afgørende betydning for høje frekvenser om man tager højde for koblingen eller ej. Den antyder at det vil være mere hensigtsmæssigt at benytte en én-dimensional løsning der tager højde for koblingen, end en løsning der har den rigtige dimension og dermed tager højde for randeffektproblemer, men ikke tager højde for koblingen. Dette resultat er dog specifikt for den benyttede geometri og de benyttede randbetingelser, og kan være anderledes i en anden situation.

7.5 Opsamling

Det koblede partielle differentialligningssystem blev formuleret dimensionsløst på en måde så de fire karakteristiske størrelser, den termiske bølgevektor, den transversale og longitudinale mekaniske bølgevektor og γ^* indgår. En lidt modifieret udgave af dette system blev løst numerisk for en én- og to-dimensional geometri. Det viste sig at være af relativt stor betydning hvordan ligningssystemet blev formuleret i Femlab.

Den én-dimensionale numeriske løsning passede med den analytiske og den to-

dimensionale kan reproducere resultater, fra løsning af den almindelige diffusionsligning, i en situation hvor der ikke er kobling mellem de termiske og mekaniske egenskaber. Da den numeriske løsning desuden er konvergeret i det frekvensområde jeg betragter, er det alt i alt sandsynligt at disse numeriske løsninger er pålidelige.

Det ser ud som om, at det er muligt, at der er et frekvensområde, hvor den én-dimensionale analytiske løsning kan beskrive den to-dimensionale numeriske løsning tilfredsstillende. Den én-dimensionale analytiske løsning beskriver de koblede numeriske løsninger bedre, for frekvenser højere end omtrent 10, end de todimensionale ukoblede gør. Det kan dog forventes at brugbarheden af den én-dimensionale analytiske løsning er stærkt afhængig af eksperimentets geometri, herunder specielt de mekaniske randbetingelser.

De 'buler' der ses på graferne for lavere frekvenser må forventes at være et udtryk for termiske randeffekter. Dette slører selvfølgelig den information, man kan få om effekten af det koblede problem ved lave frekvenser. Dette kunne jeg muligvis være kommet uden om ved at lade varmepladen fylde hele x -aksen på figur 7.4, idet man så kunne forvente at der kun ville være diffusion i retningen væk fra varmepladen.

8 Opsamling og konklusion

For det termiske randeffektproblem fandt jeg ud af, at det ser ud til, at man i den numeriske admittans både kunne identificere en effekt fra den isoterme rand i bunden af substratet og den adiabatiske rand i resten af cylinderen. Realdelen er domineret af den isoterme rand og det er ikke muligt at få øje på de andre randeffektproblemer i grafen for den. På grafen for imaginærdelen er der et 'knæk' der ser ud til at kunne skyldes den adiabatiske rand. Det er dog svært at vurdere disse randeffekter for den tre-dimensionale løsning, idet der godt kan strømme varme fra det ene domæne til det andet, uden om varmepladen.

Det koblede partielle differentialligningssystem blev som sagt formuleret dimensionsløst så de fire karakteristiske størrelser, den termiske bølgevektor, den transversale og longitudinale mekaniske bølgevektor og γ^* indgår. En lidt modificeret udgave af dette system blev løst numerisk for en én- og to-dimensional geometri.

Diskussionen om perspektiverne, i brugen af numeriske metoder til databehandling, kan deles op i to væsensforskellige kategorier.

Den første kategori er af kvantitativ art. Dels kan man fitte approksimative udtryk til kurveformen for numeriske løsninger, for en given eksperimentel opstilling. Og dels kan man, som jeg forsøgte i afsnit 6.5, benytte den numeriske metode til at fitte varmekapaciteterne ud fra de målte termiske admittanser. Dette kræver dog en ret god fitterutine; man skal have en metode til at sandssynliggøre at rutinen (altid) finder de rigtige værdier for varmekapaciteterne. Der er selvfølgelig mest perspektiv i denne metode, hvis man kan fitte varmekapaciteterne udfra løsning af det fulde koblede problem, i en geometri der repræsenterer den benyttede eksperimentelle opstilling.

I denne sammenhæng har Femlab den store force at man kan specificere alverdens komplicerede geometrier. Ulempen er at man kan risikere at ende med simuleringer, der tager så lang tid, kræver så meget computerhukommelse og desuden har problemer med konvergensen. Konsekvensen af dette vil være at denne metode bliver ufremkommelig.

Den anden kategori omhandler et designmæssigt perspektiv. Den viden, om admittansens afhængighed af eksperimentets geometri, som man får gennem numeriske simuleringer af en given opstilling kan bruges til at designe eksperimentet således, at den efterfølgende databehandling bliver så simpel som mulig. Dette gør sig for eksempel gældende for nærværende behandling af det termiske randeffektproblem. En af de elementer der komplicerer fortolkningen af resultaterne fra dette

eksperiment er, at der er involveret flere forskellige randeffektproblemer. Som vi huskede var der randeffekter hidrørende fra substratets bagkant, varmepladens størrelse og glasrøret. For at slippe for - nogle af - disse komplikationer kunne man prøve at lave varmepladen, så den fylder hele glasrørets indre radius, forudsat dette er eksperimentelt muligt. Dermed slipper man for randeffekter fra varmepladens størrelse, og randeffekten fra substratets bagkant bliver nemmere at tage højde for, idet der ikke længere kan transporteres varme fra væske til substrat, eller omvendt, 'udenom' varmepladen. Dette vil formodentlig være en geometri der i sin natur er mere én-dimensional, men hvor der selvfølgelig stadigvæk skal tages højde for randeffekter på grund af glasrøret. Det vil være muligt at undersøge om dette forslag er konstruktivt, før man designer sit eksperiment om, ved at implementere og løse problemet i Femlab.

I denne rapport er der lavet indledende undersøgelser af både randeffekt problemet og det koblede termoviskoelastiske problem. Der er som allerede beskrevet flere forskellige perspektiver man kunne undersøge yderligere. Det kunne endvidere være nyttigt at finde ud af i hvilke situationer og geometrier den én-dimensionale analytiske løsning af det koblede problem er en god approksimation. Dette kan man forestille sig kan undersøges både af numerisk og analytisk vej. Det ville være en stor fordel at kunne tage højde for koblingen mellem det termiske og mekaniske respons, blot ved at erstatte varmekapaciteten c_p med c_l , den longitudinale varmekapacitet. Herefter ville randeffektproblemet kunne behandles for den ukoblede situation alene, enten numerisk, som gjort i første del af denne rapport, eller analytisk.

Litteratur

Adam, G. & Gibbs, J. (1965). On temperature dependence of cooperative relaxation properties in glass-forming liquids, *J. Chem. Phys.* **43**(1): 139–.

Behrens, C. (2002). noter.

Birge, N. O., Dixon, P. K. & Menon, N. (1997). Specific heat spectroscopy: Origins status and applications of the 3ω method, *Thermochimica Acta* **304/305**: 51–66.

Carslaw, H. S. & Jaeger, J. C. (1959). *Conduction of Heat in Solids*, Clarendon, Oxford.

Christensen, R. M. (1982). *Theory of Viscoelasticity*, 2 edn, Academic Press.

Christensen, T. (1989). En metode til bestemmelse af den frekvensafhængige varmefylde af en underafkølet væske ved glasovergangen, Tekster fra IMFUFA (nr.184), RUC.

Christensen, T. (2002). Samtaler.

Christensen, T. C. & Olsen, N. B. (1998). Thermoviscoelasticity of glass-forming liquids, *Journal of Non-Crystalline Solids* **235-237**: 296–301.

Christensen, T. E. (n.d.). noter.

Christensen, T. & Olsen, N. B. (1997). How to compare the frequency dependent adiabatic compressibility with other thermoviscoelastic response functions at the glass transition, *Progress of Theoretical Physics Supp.* No. **126**: 273–276.

Christiansen, P. V. (1978). Dynamik og diagrammer, Tekster fra IMFUFA (nr.8), RUC.

Cohen, M. H. & Turnbull, D. (1959). Molecular transport in liquids and glasses, *J. Chem. Phys.* **31**(5): 1164–1169.

Dyre, J., Olsen, N. & Christensen, T. (1996). Local elastic expansion model for viscous-flow activation energies, *Phys. Rev. B* **53**(5): 2171–2174.

Femlab Reference Manual (n.d.). 2.2 edn.

- Feynmann, R. P., Leighton, R. B. & Sands, M. (1964). *The Feynmann Lectures on Physics*, Vol. II, Addison-Wesley.
- Harrison, G. (1976). *The Dynamic Properties of Supercooled Liquids*, Academic Press, London.
- Kupradze, V. D. (1979). *Three-dimensional problems of the mathematical theory of elasticity and thermoelasticity*, North-Holland Publishing Company.
- Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. (1986). *Theory of Elasticity*, Course of Theoretical Physics, vol.7, 3 edn, Pergamon Press.
- Lide, D. R. (ed.) (1999-2000). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 80 edn, CRC Press.
- Menon, N. (1996). Dynamic specific heat of a supercooled liquid, *J. Chem. Phys.* **105**(12): 5246-5257.
- Moon, I. K., Jeong, Y. H. & Kwun, S. I. (1996). The 3ω technique for measuring dynamic specific heat and thermal conductivity of a liquid or solid, *Rev. Sci. Instrum.* **67**(1): 29-35.
- Nowacki, W. (1986). *Thermoelasticity*, 2 edn, Pergamon Press.
- Sommerfeld, A. (1950). *Mechanics of Deformable Bodies*, Lectures on theoretical physics, vol.II, Academic Press, Inc., New York.

Liste over tidligere udsendte tekster kan ses på IMFUFA's hjemmeside: <http://mmf.ruc.dk>
eller retvirkeres på sekretariatet, tlf. 46 74 22 63 eller e-mail: imfufa@ruc.dk.

- 332/97 ANOMAL SWELLING AF LIPIDE DOBBELTLAG
Specialrapport af: Stine Kortemann
Vejleder: Dorthe Posselt
- 333/97 Biodiversity Matters
an extension of methods found in the literature on monetisation of biodiversity
by: Bernd Kuemmel
- 334/97 LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH ENERGY SYSTEM
by: Bernd Kuemmel and Bent Sørensen
- 335/97 Dynamics of Amorphous Solids and Viscous Liquids
by: Jeppe C. Dyre
- 336/97 Problem-orientated Group Project Work at Roskilde University
by: Kathrine Legge
- 337/97 Verdensbankens globale befolkningsprognose
- et projekt om matematisk modellering
af: Jørn Chr. Bendtsen, Kurt Jensen, Per Pauli Petersen
- 338/97 Kvantisering af nanolederes elektriske ledningsevne
Første modul fysikprojekt
af: Søren Dam, Esben Danielsen, Martin Niss,
Esben Friis Pedersen, Frederik Resen Steensrød
Vejleder: Tage Christensen
- 339/97 Defining Discipline
by: Wolfgang Coy
- 340/97 Prime ends revisited - a geometric point of view -
by: Carsten Lunde Petersen
- 341/97 Two chapters on the teaching, learning and assessment of geometry
by: Mogens Niss
- 342/97 A global clean fossil scenario DISCUSSION PAPER prepared by Bernd Kuemmel
for the project LONG-TERM SCENARIOS FOR GLOBAL ENERGY DEMAND
AND SUPPLY
- 343/97 IMPORT/EKSPORT-POLITIK SOM REDSKAB TIL OPTIMERET UDNYTTELSE
AF EL PRODUCERET PÅ VE-ANLÆG
af: Peter Meibom, Torben Svendsen, Bent Sørensen
- 344/97 Puzzles and Siegel disks
by: Carsten Lunde-Petersen
- 345/98 Modeling the Arterial System with Reference to an Anesthesia Simulator
Ph.D. Thesis
by: Mette Sofie Olufsen
- 346/98 Klyngedannelse i en hulkatode-forsøvningsproces
af: Sebastian Horst
Vejleder: Jørn Borggren, NBI, Niels Boye Olsen
- 347/98 Verificering af Matematiske Modeller
- en analyse af Den Danske Eulerste Model
af: Jonas Blomqvist, Tom Pedersen, Karen Timmermann, Lisbet Ølhenschläger
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 348/98 Case study of the environmental permission procedure and the environmental impact
assessment for power plants in Denmark
by: Stefan Krüger Nielsen
project leader: Bent Sørensen
- 349/98 Tre rapporter fra FAGMAT - et projekt om tal og faglig matematik i
arbejdsmarkedsdannelserne
af: Lena Lindenskov og Trine Wedege
- 350/98 OPGAVESAMLING - Brede-Kursus i Fysik 1976 - 1998
Erstatter lektierne 3/78, 2/81/93 og 3/22/96
- 351/98 Aspects of the Nature and State of Research in Mathematics Education
by: Mogens Niss
- 352/98 The Herman-Swiatec Theorem with applications
by: Carsten Lunde Petersen
- 353/98 Problemløsning og modellering i en almændanne matematikundervisning
Specialrapport af: Per Gregersen og Tomas Højgaard Jensen
- 354/98 A Global Renewable Energy Scenario
by: Bent Sørensen and Peter Meibom
- 355/98 Convergence of rational rays in parameter spaces
by: Carsten Lunde Petersen and Gustav Ryd

356/98	Terrænmodellering Analys af en matematisk model til konstruktion af digitale terrænmodeller Modelprojekt af: Thomas Frommelt, Hans Ravnljær Larsen og Arnold Skimminge Vejleder: Johnny Ottesen	367/99	Boundary Reduction of Spectral Invariants and Unique Continuation Property by: Bernhelm Boos-Bavbek
357/98	Cayleys Problem En historisk analyse af arbejdet med Cayleys problem fra 1870 til 1918 Et matematisk videnskabsfagsprojekt af: Rikke Degrn, Bo Jakobsen, Bjarke K. W. Hansen, Jesper S. Hansen, Jesper Udesen, Peter C. Wulff Vejleder: Jesper Larsen	368/99	Kvartvejsrapport for projektet SCENARIER FOR SAMLET UDNYTTELSE AF BRINT SOM ENERGIBÆRER I DANMARKS FREMTIDIGE ENERGISYSTEM Projektleder: Bent Sørensen
358/98	Modeling of Feedback Mechanisms which Control the Heart Function in a View to an Implementation in Cardiovascular Models Ph.D. Thesis by: Michael Danielsen	369/99	Dynamics of Complex Quadratic Correspondences by: Jacob S. Jølving Supervisor: Carsten Lunde Petersen
359/99	Long-Term Scenarios for Global Energy Demand and Supply Four Global Greenhouse Mitigation Scenarios by: Bent Sørensen (with contribution from Bernd Kuemmel and Peter Meibom)	370/99	OPGAVESAMLING - Bredde-Kursus i Fysik 1976 - 1999 Eksamensopgaver fra perioden 1976 - 1999. Denne tekst erstatter tekst nr. 350/98
360/99	SYMMETRI I FYSIK En Meta-projektrapport af: Martin Niss, Bo Jakobsen & Tine Bjarke Bonné Vejleder: Peder Voetmann Christiansen	371/99	Beviselets stilling - beviser og bevisførelse i en gymnasial matematik undervisning Et matematikspeciale af: Maria Hermansson Vejleder: Mogens Niss
361/99	Symplectic Functional Analysis and Spectral Invariants by: Bernhelm Booß-Bavbek, Kenro Funanari	372/99	En kontekstualiseret matematikhistorisk analyse af ikke-lineær programmering: Udviklingshistorie og multipe opdagelse Ph.d.-afhandling af Timme Hoff Kjeldsen
362/99	Er matematik en naturvidenskab? - en udspænding af diskussionen En videnskabsfagsprojekt-rapport af: Martin Niss Vejleder: Mogens Nørgaard Olesen	373/99	Criss-Cross Reduction of the Maslov Index and a Proof of the Yoshida-Nicaescu Theorem by: Bernhelm Booß-Bavbek, Kenro Funanari and Nobukazu Otsuki
363/99	EMERGENCE AND DOWNWARD CAUSATION by: Donald T. Campbell, Mark H. Bickhard, and Peder V. Christiansen	374/99	Det hydrauliske spring - Et eksperimentelt studie af polygoner og hastighedsprofiler Specialeafhandling af: Anders Marcusen Vejledere: Tomas Bohr, Clive Ellegaard, Bent C. Jørgensen
364/99	Illustrationens kraft - Visuel formidling af fysik Integretet speciale i fysik og kommunikation af Sebastian Horst Vejledere: Karin Beyer, Søren Kjørup	375/99	Begrundelsen for Matematikkundervisningen i den færde skole hhv. Gymnasiets 1884- 1914 Historiespeciale af Henrik Andreassen, cand.mag. i Historie og Matematik
365/99	To know - or not to know - mathematics, that is a question of context by: Tine Wedege	376/99	Universality of AC conduction in disordered solids by: Jeppe C. Dyre, Thomas B. Schröder
366/99	LATEX FOR FORFATTERE - En introduktion til LATEX og IMFUFA-LATEX af: Jørgen Larsen	377/99	The Kuhn-Tucker Theorem in Nonlinear Programming: A Multiple Discovery? by: Timme Hoff Kjeldsen
378/00	Solar energy preprints: 1. Renewable energy sources and thermal energy storage 2. Integration of photovoltaic cells into the global energy system by: Bent Sørensen		

379/00	EULERS DIFFERENTIALREGNING Eulers indførelse af differentialregningen stillet over for den moderne En tredjeseesters projektrapport på den naturvidenskabelige basisuddannelse af: Uffe Thomas Volmer, Jankvist, Rie Rose Møller Pedersen, Maja Bagge Pedersen Vejleder: Jørgen Larsen	389/00 University mathematics based on problemoriented student projects: 25 years of experience with the Roskilde model By: Mogens Niss Do not ask what mathematics can do for modelling. Ask what modelling can do for mathematics! by: Johnny Ottesen
380/00	MATEMATISK MODELLERING AF HJERTEFUNKTIONEN Isovolumetrisk ventrikulær kontraktion og udspumning til det cardiovaskulære system af: Gitte Andersen (3.modulns-rapport), Jakob Hilmer og Stine Weisbjerg (speciale) Vejleder: Johnny Ottesen	390/01 SCENARIER FOR SAMLET UDNYTTELSE AF BRINT SOM ENERGIBÆRER I DANMARKS FREMTIDIGE ENERGISYSTEM Slutrapport, april 2001 Projektleder: Bent Sørensen Projektdeltagere: DONG, Aksel Hauge Petersen, Celia Juhl, Elkraft System [#] , Thomas Engberg Pedersen [#] , Hans Ravn, Charlotte Søndergren, Energi 2 ⁺ , Peter Simonsen, RISO Systemanalyseatd.: Kai Jørgensen [*] , Lars Henrik Nielsen, Helge V. Larsen, Poul Erik Mørhorst, Lotte Schleisner, RUC: Finn Sørensen ^{**} , Bent Sørensen [#] Indtil 1/1-2000 Elkraft, ^{**} fra 1/5-2000 Cowi Consult * Indtil 15/6-1999 DTU Bygninger & Energi, fra 1/1-2001 Polypeptide Labs. Projekt 1763/99-0001 under Energistyrelsens Brintraprogram
381/00	Matematikviden og teknologiske kompetencer hos kortuddannede voksne - Rekognosceringer og konstruktioner i grænseområdet mellem matematikkens didaktik og forskning i voksenuddannelse Ph. d.-afhandling af Tine Wedege	391/01 Matematiske modelleringsskompetence – et undervisningsforsøg i gymnasiet 3. semesters Nat.Bas. projekt af: Jess Tolstrup Boe, Morten Bjørn-Mortensen, Sofie Inari Castella, Jan Lauridsen, Maria Grøtsche, Ditte Mandøe Andreasen Vejleder: Johnny Ottesen
382/00	Den selvundvigende vandring Et matematisk professionsprojekt af: Martin Niss, Arnold Skimminge Vejledere: Viggo Andreasen, John Villumsen	392/01 "PHYSICS REVEALED" THE METHODS AND SUBJECT MATTER OF PHYSICS an introduction to pedestrians (but not excluding cyclists) PART II: PHYSICS IN PHILOSOPHICAL CONTEXT by: Bent Sørensen.
383/00	Beviser i matematik af: Anne K.S.Jensen, Gitte M. Jensen, Jesper Thrane, Karen L.A.W. Wille, Peter Wulff Vejleder: Mogens Niss	393/01 Hilberts matematikfilosofi Specialerapport af: Jesper Hasmark Andersen Vejleder: Stig Andur Pedersen
384/00	Hopping in Disordered Media: A Model Glass Former and A Hopping Model Ph.D. thesis by: Thomas B. Schroder Supervisor: Jeppe C. Dyre	394/01 "PHYSICS REVEALED" THE METHODS AND SUBJECT MATTER OF PHYSICS an introduction to pedestrians (but not excluding cyclists) PART II: PHYSICS PROPER by: Bent Sørensen.
385/00	The Geometry of Cauchy Data Spaces This report is dedicated to the memory of Jean Leray (1906-1998) by: B. Booss-Bavnbek, K. Furutani, K. P. Wojciechowski	395/01 Menneskers forhold til matematik. Det har sine årsager! Specialeafhandling af: Anita Stark, Agnete K. Ravnborg Vejleder: Tine Wedege
386/00	Neutralne mandatfordelingsmetoder – en illusion? af: Hans Henrik Brok-Kristensen, Knud Dyrberg, Tove Oxager, Jens Sveistrup Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek	396/01 2 bilag til tekst nr. 395: Menneskers forhold til matematik. Det har sine årsager! Specialeafhandling af: Anita Stark, Agnete K. Ravnborg Vejleder: Tine Wedege
387/00	A History of the Minimax Theorem: von Neumann's Conception of the Minimax Theorem -- A Journey Through Different Mathematical Contexts by: Tinne Hoff Kjeldsen	
388/00	Behandling af impuls ved kilder og dræn i C. S. Peskins 2D-hjertemodell et 2. modulns matematik modelprojekt af: Bo Jakobsen, Kristine Niss Vejleder: Jesper Larsen	

397/01	En undersøgelse af solvents og kædetænges betydning for anomal swelling i phospholipiddobbeltslag 2. modul fysikrapport af: Kristine Niss, Arnold Skimminge, Esben Thormann, Stine Timmermann Vejleder: Dorte Posselt	408/02	Weak UCP and Perturbed Monopole Equations By: Bernhelm Booss-Bavnbek, Matilde Marcolli, Bai-Ling Wang
398/01	Kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse" (E1) Af: Mogens Brun Heefelt	409/02	Algebraisk ligningsløsning fra Cardano til Cauchy - et studie af kombinationers, permutations samt invariansbegrerets betydning for den algebraiske ligningsløsning for Gauss, Abel og Galois Videnskabsfagsprojekt af: David Heiberg Backchi, Uffe Thomas Volmer Jankvist, Neslihan Saglamnak Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
399/01	Undergraduate Learning Difficulties and Mathematical Reasoning Ph.D Thesis by: Johan Lütther Supervisor: Mogens Niss	410/02	2 projekter om modellering af influenzaepidemier Influenzaepidemier- et matematisk modelleringprojekt Af: Claus Jørgensen, Christina Lohfert, Martin Mikkelsen, Anne-Louise H. Nielsen Vejleder: Morten Blomhøj Influenza A: Den tilbagevendende plage – et modelleringprojekt Af: Beth Paludan Carlsen, Christian Dahmcke, Lena Petersen, Michael Wagner Vejleder: Morten Blomhøj
400/01	On Holomorphic Critical quasi circle maps By: Carsten Lund Pedersen	411/02	Polygonformede hydrauliske spring Et modelleringprojekt af: Kåre Stokvad Hansen, Ditte Jørgensen, Johan Renby Pedersen, Bjørn Toldbod Vejleder: Jesper Larsen
401/01	Finite Type Arithmetic Computable Existence Analysed by Modified Realisability and Functional Interpretation Master's Thesis by: Klaus Frovin Jørgensen Supervisors: Ulrich Kohlennbach, Stig Andur Pedersen and Anders Madsen	412/02	Hopfbifurkation og topologi i væskestromning – en generel analyse samt en behandling af strømmingen bag en cylinder Et matematisk modul III professionsprojekt af: Kristine Niss, Bo Jakobsen Vejledere: Morten Brøns, Johnny Ottesen
402/01	Matematisk modellering ved den naturvidenskabelige basisuddannelse - udvikling af et kursus Af: Morten Blomhøj, Tomas Hejgaard Jensen, Tinne Hoff Kjeldsen og Johnny Ottesen	413/03	"Elevernes stemmer" Fysikfaget, undervisningen og læreroller, som eleverne opfatter det i det almindelige gymnasium i Danmark Af: Carl Angel, Albert Chr. Paulsen Vejleder: Tage Emil Christensen
403/01	Generaliseringer i integralteorien - En undersøgelse af Lebesgue-integralet, Radon-integralet og Perron-integralet Et 2. modul matematikprojekt udarbejdet af: Stine Timmermann og Eva Uhre Vejledere: Bernhelm Booss-Bavnbek og Tinne Hoff Kjeldsen	414/03	Feltlinediagrammer En vej til forståelse? Et 1. modul fysikprojekt af: Ditte Gundersen, Kåre Stokvad Hansen, Ulf Rønbæk Pedersen Vejleder: Tage Emil Christensen
404/01	"Mere spredt fagtagning" Af: Jens Hejgaard Jensen	415/03	FYSIKFAGET I FORANDRING Læring og undervisning i fysik i gymnasiet med fokus på dialogiske processer, autenticitet og kompetenceudvikling Ph.d.-afhandling i fysikdidaktik af: Jens Dolin
405/01	Real life routing - en strategi for et virkeligt vrp Et matematisk modelprojekt af: David Heiberg Backchi, Rasmus Brauner Godiksen, Uffe Thomas Volmer Jankvist, Jørgyan Martin Poulsen og Neslihan Saglamnak Vejleder: Jørgen Larsen	416/03	Fourier og Funktionsbegrebet - Overgangen fra Eulers til Dirichlets funktionsbegreb Projektrapport af: Rasmus Brauner Godiksen, Claus Jørgensen, Tony Moyer Hanberg, Bjørn Toldbod Vejleder: Erik von Essen
406/01	Opgavesamling til dydtekursus i fysik Eksamensopgaver stillet i perioden juni 1976 til juni 2001 Denne tekst erstatter tekstdt nr. 25/1980 + efterfølgende tillæg	407/01	Unbounded Fredholm Operators and Spectral Flow By: Bernhelm Booss-Bavnbek, Matthias Lesch, John Phillips

- 417/03 The Semiotic Flora of Elementary particles
By: Peder Voetmann Christiansen
- 418/03 Militærmatematik set med kompetencebriller
3. modul projektrapport af: Gitte Jensen og specialetrapport af: Jesper Thrane
Vejleder: Tine Wedege
- 419/03 Energy Bond Graphs – a semiotic formalization of modern physics
By: Peder Voetmann Christiansen
- 420/03 Stemning og Musikalsk Konsomans
Et matematisk modelleringprojekt af: Claus Jørgensen
Vejleder: Johnny Ottesen
- OPGAVESAMLING
Bredde-kursus i fysik 1976 – 2003.
Denne tekst erstatter tekst nr. 370/99
- 422/03 Vurdering af dynamisk blodstrømningsmodel
- ved numerisk simulering med FEMLAB
Et 2. modul matematikprojekt af: Sofie Inari Castella, Ingunn Gunnarsdóttir og Jacob Kirkensgaard Hansen
Vejleder: Johnny Ottesen
- 423/03 Fysikkens historie i en almændannende fysikundervisning
- Eksemplificeret med Millikan Ehrenhaft kontroversen
Specialetrapport af: Marianne Wilcken Bjerregaard
Vejleder: Albert Chr. Paulsen
- 424/03 Dielectric and Shear Mechanical Relaxation in Glass Forming Liquids
- A thorough analysis and experimental test of the DiMarzio-Bishop model
Master thesis in physics by: Kristine Niss and Bo Jakobsen
Supervised by: Niels Boye Olsen
- 425/03 Fysiske forklaringer i undervisning
Specialetrapport af: Kirsten Ringgaard Jensen
Vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 426/04 Myrentillegens
Distribuering af Ant Colony System Traveling Salesman Problem
Et 2. modul datalogiprojekt af: Uffe Thomas Volmer Jankvist og Magnus Meinild
Vejleder: Keld Heisgaun
- 427/04 Fra Leibniz til Isabelle
Type teoriens fremkomst og udvikling samt dens anvendelse i bevisføreren *Isabelle*
Et 3. modul datalogiprojekt af: Ingunn Gunnarsdóttir, Uffe Thomas Volmer Jankvist og Bjørn Toldbod
Vejleder: Jørgen Villadsen