

Desintegration von Fluiden im Ultraschallfeld: Modellierung, Simulation, Experiment

Vom Fachbereich Chemie und Chemietechnik
der Universität Paderborn genehmigte

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften
- Dr. rer. nat. -

von
Diplom-Chemiker
OLIVER REIPSCHLÄGER

Paderborn 2002

TC-Schriftenreihe

Band 11

Oliver Reipschläger

**Desintegration von Fluiden im Ultraschallfeld:
Modellierung, Simulation, Experiment**

D 466 (Diss. Universität-GH Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2002

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Reipschläger, Oliver:

Desintegration von Fluiden im Ultraschallfeld: Modellierung, Simulation,
Experiment/Oliver Reipschläger.

Aachen: Shaker, 2002

(TC-Schriftenreihe; Bd. 11)

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2002

ISBN 3-8322-0708-2

Copyright Shaker Verlag 2002

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-0708-2

ISSN 1433-6499

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von August 1998 bis Mai 2002 im Fachgebiet Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik des Fachbereiches Chemie und Chemietechnik der Universität Paderborn angefertigt.

Referent: Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke
Universität Paderborn
Fachbereich Chemie und Chemietechnik
Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik

Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. J. Prüß
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Fachbereich Mathematik und Informatik
Institut für Analysis

Datum der Abgabe: 22. Mai 2002

Datum der mündlichen Prüfung: 12. Juli 2002

Hiermit möchte ich mich bei allen bedanken, die durch ihre Unterstützung und Hilfe das Gelingen dieser Arbeit ermöglicht haben. Insbesondere gilt mein Dank:

Herrn Prof. Dr. Hans-Joachim Warnecke für die interessante Themenstellung und seine intensive fachliche und herzliche persönliche Betreuung,

Herrn Prof. Dr. Jan Prüß für die Übernahme des Korreferates und für die konstruktiven Diskussionen bei mathematischen Fragestellungen,

Herrn PD Dr. Dieter Bothe für die intensive fachliche Unterstützung und Hilfe bei numerischen und mathematischen Fragen, insbesondere bei der Erarbeitung der Theorie zur Modellierung von Zweiphasensystemen,

Herrn Prof. Dr. Bernhard Weigand und Herrn Dr. Norbert Roth vom Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) der Universität Stuttgart für den kompetenten Rat, die Bereitstellung des Programms *FS3D* und von Versuchsaapparaturen, und die Ermöglichung meines Aufenthalts am ITLR, die diese Zeit sehr produktiv werden ließ,

Herrn Prof. Dr. Arthur Goldschmidt vom Institut für Chemie und Technologie der Beschichtungsstoffe (CTB) Paderborn für die anwendungsorientierte Themenstellung,

Herrn Dipl. Chem. Jörn Vestweber vom CTB für die gute Zusammenarbeit im Projekt,

Frau Dipl. Math. Kerstin Wielage vom Paderborn Center for Parallel Computing (PC²) für die Hilfe beim Programmieren und im Umgang mit Parallelrechnern,

Herrn Dipl.-Ing. Matthias Hase vom ITLR Stuttgart für fachliche und andere Diskussionen und seine Gastfreundschaft,

und allen nicht namentlich genannten Mitarbeitern und Freunden, die mich mit Rat und Tat unterstützt haben.

Meiner Familie

Inhaltsverzeichnis

Notation	V
1 Einleitung	1
1.1 Problemstellung	2
1.2 Stand des Wissens	3
1.3 Ziel der Arbeit	4
2 Theoretische Grundlagen	7
2.1 Bilanzierung von Zweiphasenströmungen	7
2.1.1 Grenzflächenspannung	7
2.1.2 Integrale Bilanzen	8
2.1.3 Differentielle Bilanzen	13
2.1.4 Sprungbedingungen	15
2.2 Grundlagen der Schallausbreitung	17
2.3 Ebene Schallwellen kleiner Amplitude	20
3 Experimentelle Untersuchungen	21
3.1 Überblick	21
3.2 Kontinuierliche Ultraschall-Zerstäubung	21
3.2.1 Experimenteller Aufbau	21
3.2.2 Interferometrische Untersuchungen	23
3.2.3 Untersuchung der Strangzerstäubung	25
3.3 Ultraschall-Levitation	28

3.3.1	Experimenteller Aufbau	28
3.3.2	Mechanismen der Einzeltropfenzerstäubung	30
3.3.3	Quantifizierende Experimente	32
4	Numerische Verfahren	35
4.1	Anforderungen an das numerische Verfahren	35
4.2	Wahl des numerischen Verfahrens	36
4.3	Abfolge der Simulation	39
4.4	Verfahren zur Simulation des Ultraschallfelds	41
4.5	Verfahren zur Simulation der freien Grenzfläche	45
4.5.1	Das VOF-Modell	45
4.5.2	Grenzflächenspannung	46
4.5.3	Numerische Implementierung der Grenzflächenkraft	48
4.5.4	Fehler bei der Simulation der Grenzflächendynamik	49
4.6	Kopplung der numerischen Verfahren	51
4.6.1	Modellierung der Grenzflächenquellterme	51
4.6.2	Numerische Implementierung der Grenzflächenquellterme	52
4.6.3	Ansatz zur Berücksichtigung von Rückwirkungen	55
5	Simulation	59
5.1	Simulation von Ultraschallfeldern	59
5.1.1	Frei strahlender planarer Schwinger	59
5.1.2	Resonatoren planarer Geometrie	60
5.1.3	Resonatoren konkaver Geometrie	65

5.1.4	Variation geometrischer Faktoren	67
5.2	Simulation des Desintegrationsprozesses	70
5.2.1	Simulation von Einzeltröpfchen im Ultraschallfeld	70
5.2.2	Einfluss von Rückwirkungen der Tröpfchen auf das Schallfeld	74
5.2.3	Simulation der Strangzerstäubung	79
5.2.4	Variation stofflicher Eigenschaften	83
6	Zusammenfassung und Ausblick	87
A	Mathematischer Anhang	90
A.1	Gaußscher Integralsatz	90
A.2	Stokesscher Integralsatz	90
A.3	Leibniz-Regel	90
A.4	Diracsche Deltafunktion	91
	Literatur	92

Notation

<i>Symbol</i>	Einheit	Bedeutung
A	[m ²]	Fläche
a	[N/m ²]	Akustische Amplitude
B_r	[m ³]	Kugelvolumen
c	[m/s]	Schallgeschwindigkeit
c_p, c_v	[J/kg K]	Spezifische Wärmekapazität
C	[m]	Kurve
F, \mathbf{f}, f	[N]	Kraft
f	[–]	Volumenanteilsfunktion
G	[–]	Gebiet
\mathbf{g}	[m/s ²]	Erdbeschleunigung
H	[J/kg]	Totale Enthalpie
h	[J/kg]	Thermodynamische Enthalpie
\mathbf{I}	[Ns]	Impuls
\mathbf{I}	[–]	Einheitstensor
\mathbf{J}	[kg/m ² s]	Fluß
K, k	[1/m]	Mittlere Krümmung, Hauptkrümmung
k	[1/m]	Wellenzahl
l	[m]	Länge
m	[kg]	Masse
\mathbf{n}	[–]	Oberflächen-Normale
P	[–]	Punkt im dreidimensionalen Raum
p	[N/m ²]	Druck
R	[J/(K mol)]	Gaskonstante
r	[m]	Krümmungsradius
r, θ, z	[m, –, m]	Zylinderkoordinaten
\mathbf{r}	[m]	Ortsvektor
S	[–]	Quellterm
\mathbf{s}	[m]	Linielement
T	[K]	Temperatur
\mathbf{t}	[m]	Tangentialvektor
t	[s]	Zeit
\mathbf{u}	[m/s]	Absolute Geschwindigkeit
u, v, w	[m/s]	Geschwindigkeiten in (x, y, z) - Richtung
V	[m ³]	Volumen
W	[J/m ²]	Grenzflächenenergie
W	[kg/mol]	Molekülgewicht
x, y, z	[m]	Kartesische Koordinaten

<i>Symbol</i>	<i>Einheit</i>	<i>Bedeutung</i>
α	[–]	Winkel
Γ	[m ²]	Grenzfläche
δ	[–]	Diracsche Deltafunktion
κ	[1/m]	Krümmung
λ	[kg/ms]	Bulkviskosität
λ	[m]	Wellenlänge
∇	$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z}$	Nabla-Operator
μ	[kg/m s]	Dynamische Viskosität
ν	[kg/m s]	Kinematische Viskosität
ν	[1/s]	Frequenz
ρ	[kg/m ³]	Dichte
σ	[N/m]	Grenzflächenspannung
Φ, ϕ	[–]	Strömungsvariable
φ	[–]	Winkel
φ	[–]	Geschwindigkeitspotential
Ψ	[–]	Begrenzer
Ω	[–]	Phasenraum, Bilanzraum
ω	[1/s]	Kreisfrequenz

Indices

+, –	Phasenindex
~	Abweichung vom Mittelwert
Γ	Grenzfläche
g	Gas
i, j, k	Zellindizierung in (x, y, z) -Richtung
Q	Quellterm
s	sphärisch
st	Grenzflächenspannung
W, P, E	Kontrollvolumen-Notation