

Technische Universität Berlin

Institut für Mechanik
Fachgebiet Kontinuumsmechanik und Materialtheorie

Projekt Simulationstools und ihre Anwendung

Viskositätsmessung und Simulation eines Fluids

von

Wilhelm Hübner (320419)

Stefan Schulz, B.Sc. (320112)

Wily Atiogo (331350)

Betreuer:

Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang H. Müller

B. Emek Abali, *M.Sc.*

März 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Aufgabenstellung.....	2
3	Grundlagen	3
3.1	Fluide	3
3.1.1	Bingham-Fluide.....	4
3.1.2	Modelle für Bingham-Fluide.....	5
3.2	Rheologie.....	7
4	Viskositätsbestimmung von Zahnpasta	10
4.1	Messergebnisse aus der Literatur	10
4.2	Versuchsaufbau	10
4.3	Messergebnisse	13
5	Fit zwischen Messwerten und Spannungsmodellen	15
6	Simulation	17
6.1	Bilanzgleichung	17
6.1.1	Massenbilanz	17
6.1.2	Impulsbilanz	18
6.2	Annahmen und Vereinfachungen	19
6.3	Variationelle Formulierung der Gleichung.....	20
6.4	Zeitdiskretisierung und Linearisierung.....	22
6.5	Formulierung der Randbedingungen	22
6.6	Spannungsmodelle	24
6.7	Bestimmung der Materialparameter	25
7	Ergebnisse und Diskussion.....	27
8	Literaturverzeichnis.....	30

1 Einleitung

Bereits die alten Griechen wussten „Die schönste Harmonie entsteht durch Zusammenbringen von Gegensätzen“ (Heraklik). Der heutige Alltag konfrontiert jeden mit Materialien, deren Aggregatzustände als Mischung aus fest und flüssig bezeichnet werden könnte. Ihre Bezeichnung lautet Nicht-Newton'sche Fluide. Wer also sein Frühstück mit Honig beginnt, verwendet bereits an dieser Stelle ein zähflüssiges Fluid. Spätestens beim Zähneputzen lässt sich ein weiteres finden. Die Rede ist von Zahnpasta. In der folgenden Abhandlung wird sie als Beispiel für Nicht-Newton'sche Fluide benutzt.

Firmen, deren Fachgebiet viskose Fluide umfasst, investieren im Allgemeinen viel Geld in die Entwicklung der Fließfähigkeit und Qualitätssicherung ihrer Produkte. Beispielsweise müssen Hersteller für Zahnpasta garantieren können, dass sie sich auch aus der Tube drücken lässt, im Anschluss aber eine genügend feste Masse annimmt, so dass sie nicht von der Zahnbürste fließt. Ähnliche Voraussetzungen gelten für viele weitere Hygieneartikel wie Cremes und Flüssigseifen. Aber auch in der Nahrungsmittelindustrie (Honig, Ketschup, Joghurt), im Bauwesen (Frischbeton, Silikon, Teer) und anderen Bereichen werden Ansprüche für die Verarbeitung von Nicht-Newton'sche Fluiden gestellt. Für die Unternehmen ist die Wirtschaftlichkeit der Herstellprozesse ein wichtiger Faktor. Aus diesem Grund nehmen die Ausmaße der Automatisierung kontinuierlich zu.

Um aber, zum Beispiel, die automatische Befüllung von Zahnpasta-Tuben gewährleisten zu können, bedarf es entweder vieler Versuche oder einer Möglichkeit, die nötige Geometrie sowie den entsprechenden Druck der Abfüllanlage zu berechnen. Bislang ist es nur sehr eingeschränkt möglich das rheologische Verhalten von Nicht-Newton'schen Fluiden vorher zuzusagen.

Ein Kernziel dieser Arbeit ist daher, eine Grundlage zu schaffen, das Strömungsverhalten einer Vielzahl von viskosen Materialien, bei unterschiedlicher Geometrie und Lastverteilung vorherzusagen. Dazu werden Messapparaturen sowie eine Methode zur Bestimmung der notwendigen Materialparameter vorgestellt und anschließend in einer Simulation auf Richtigkeit geprüft.

2 Aufgabenstellung

Im Verlauf des Projekts soll zunächst mit Hilfe eines Rotationsviskosimeters die Viskosität von Zahncreme bestimmt werden. Anschließend werden, ausgehend von den im Experiment aufgenommenen Messwerten, die Kennwerte für ausgewählte 1D-Spannungsmodelle berechnet. Diese 1D-Spannungsmodelle sollen daraufhin in 2D- bzw. 3D-Modelle überführt werden.

Parallel dazu soll über Bilanzgleichungen die Kontinuumsgleichung für den Fließvorgang eines Fluids aufgestellt werden. Mit dieser Gleichung soll in FEniCS, einem open-source-FEM-Programm für nichtlineare Gleichungssysteme, eine 2D-Simulation des Experiments zur Viskositätsbestimmung durchgeführt werden. Dabei werden die 2D- bzw. 3D-Spannungsmodelle mit den Kennwerten verwendet, die im Experiment aufgenommen wurden.

Mit diesem Projekt soll überprüft werden, ob sich mit den 1D Kennwerten des Experiments in der Simulation die gleichen Ergebnisse erzielen lassen wie mit dem Experiment. Sollte dies der Fall sein, so wäre gezeigt, dass die Überführung der Spannungsmodelle von 1D auf 2D bzw. 3D funktioniert und auch die Bilanzgleichungen für den Fließvorgang von Zahncreme korrekt formuliert sind.

3 Grundlagen

Bevor mit den Experimenten und der anschließenden Simulation begonnen werden kann, sollen einige Grundlagen erläutert werden. Dazu gehört die Definition von Fluiden und deren Eigenschaften, sowie die Möglichkeiten zur Viskositätsbestimmung.

3.1 Fluide

Ein Fluid ist ein Stoff mit flüssigkeitsähnlichen Eigenschaften, der als Kontinuum betrachtet wird. Gase und Flüssigkeiten sind Fluide, da sich ihre Eigenschaften nur quantitativ (in ihrer Größenordnung) nicht aber qualitativ voneinander unterscheiden [1], [2]. Der Bezeichnung als Fluid stammt daher, dass sich Flüssigkeiten und Gase unter Schub- bzw. Scherspannungen kontinuierlich verformen [3].

Fluide werden nach ihrem Fließverhalten unterschieden. Zur Klassifizierung wird der Zusammenhang zwischen Schub- bzw. Scherspannung σ und Schergeschwindigkeit $\dot{\gamma}$, der das Fließverhalten des Mediums beschreibt, herangezogen.

$$\sigma = f(\dot{\gamma}) \quad 3-1$$

Die Abbildung 3.1 zeigt die Kennlinien für verschiedene Fluide.

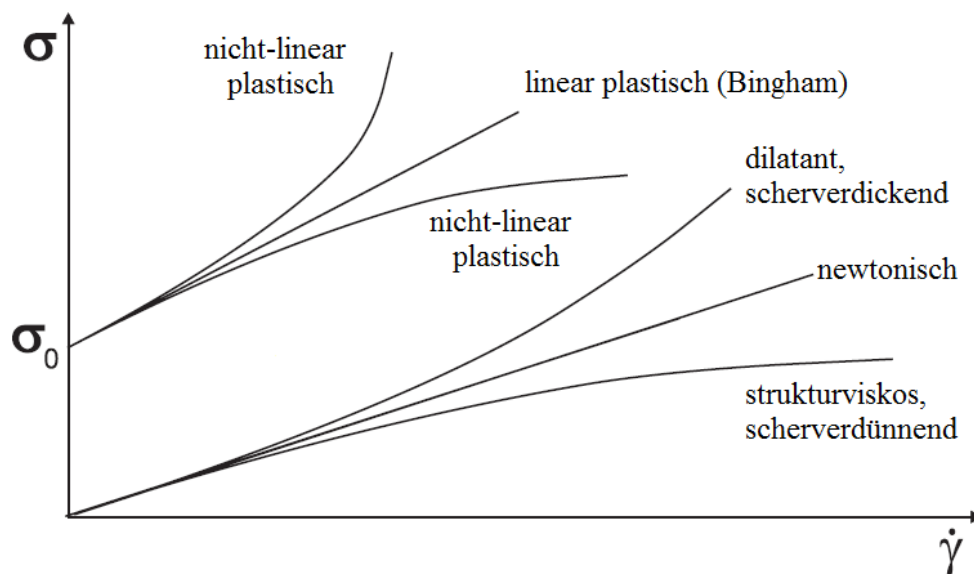


Abbildung 3.1: Einteilung von Fluiden, nach [4]

Ist der Zusammenhang zwischen Schub- bzw. Scherspannung und Schergeschwindigkeit linear, so bezeichnet man das Fluid als Newton'sches Fluid. Der Proportionalitätsfaktor zwischen Scherspannung und Schergeschwindigkeit wird als Viskosität η bezeichnet. Für 1D-Berechnungen kann für Newton'sche Fluide folgende Formel verwendet werden:

$$\sigma = \eta \dot{\gamma} \quad 3-2$$

Alle Fluide, die sich nicht mit der Formel berechnen lassen, werden als Nicht-Newton'sche Fluide bezeichnet. Zu diesen Nicht-Newton'schen Fluiden zählen unter anderem auch die Bingham-Fluide. Sie sind spezielle Nicht-Newton'sche Fluide, die sich linear plastisch verhalten. Unterhalb einer Fließgrenze σ_0 verhalten sich Bingham-Fluide wie Festkörper, d.h.

sie verformen sich unterhalb einer Fließgrenze rein elastisch. Oberhalb der Fließgrenze weisen sie ein ideal plastisches Verhalten auf, d.h. sie beginnen zu fließen. Für Bingham-Fluide wird in 1D-Berechnungen folgende Formel verwendet werden:

$$\sigma = \eta \dot{\gamma} + \sigma_0 \quad 3-3$$

Weitere Nicht-Newton'sche Fluide sind die strukturviskosen Fluide, die bei zunehmender Schergeschwindigkeit dünnflüssiger (weniger viskos) werden, die dilatanten Fluide, die bei zunehmender Schergeschwindigkeit dickflüssiger (viskoser) werden und nicht-linear-plastischen Fluide, die eine Fließgrenze besitzen, aber, im Gegensatz zu den Bingham-Fluiden, keinen linearen Zusammenhang zwischen Scherspannung und Schergeschwindigkeit bzw. Scherung.

3.1.1 Bingham-Fluide

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird verstärkt auf Bingham-Fluide eingegangen. Daher ist eine genauere Betrachtung dieser Fluide notwendig.

Wie bereits erwähnt, besitzen Bingham-Fluide eine Fließgrenze, unterhalb derer trotz Scherbelastung keine Scherung stattfindet. Stattdessen tritt unterhalb der Fließgrenze rein elastische Deformation auf, d.h. bei Entlastung bleibt die Deformation nicht erhalten [4]. Erst wenn die Fließgrenze überschritten wird, tritt plastische Deformation, das sogenannte Fließen, auf. Die Besonderheit an Bingham-Fluiden ist weiterhin, dass die Schub- bzw. Scherspannung proportional zur Schergeschwindigkeit $\dot{\gamma}$ ist, d.h. oberhalb der Fließgrenze besitzen Schub- bzw. Scherspannung und Schergeschwindigkeit einen linearen Zusammenhang. Die Abbildung 3.2 zeigt die unterschiedlichen Geschwindigkeitsprofile von Bingham-Fluiden (blaue Kurve) und Newton'schen Fluiden (rote Kurve) in einer Rohrströmung. Bingham-Fluide bewegen in der Mitte des Rohrs mit gleicher Geschwindigkeit, da die Scherspannungen dort unterhalb der Fließgrenze liegen.

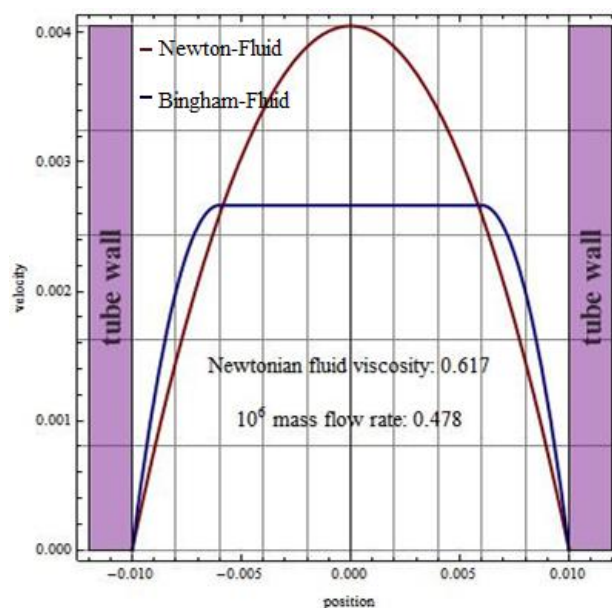


Abbildung 3.2: Unterschied im Geschwindigkeitsprofil zwischen Bingham- und Newton-Fluid bei einer Rohrströmung [5]

Allgemein sind Flüssigkeiten kompressibel, jedoch verändern sie "ihr Volumen unter Druck kaum. In der praktischen Anwendung werden Flüssigkeiten demnach als wenig kompressibel bzw. inkompressibel betrachtet[3]."

Zu den Bingham-Fluiden gehören unter anderem Zahncreme, Ketchup, Mayonnaise, sowie viele Farben und Lacke [6].

3.1.2 Modelle für Bingham-Fluide

Das Verhalten von Bingham-Fluiden lässt sich, wie oben bereits erwähnt, über folgende Gleichung beschreiben.

$$\sigma = 2\eta \dot{\gamma} + \sigma_0 \quad 3-4$$

Diese Gleichung entspricht dem Bingham-Modell, die das Verhalten von Bingham-Fluiden auf einfachste Weise beschreibt. Zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Schub- bzw. Scherspannung und Schergeschwindigkeit ist die Kenntnis der Fließgrenze und der dynamischen Viskosität notwendig. Das Bingham-Modell ist allerdings unstetig um den Nullpunkt, da bei Belastung in Gegenrichtung ebenfalls eine Fließgrenze auftritt. Es kommt beim Richtungswechsel der Schub- bzw. Scherspannung also zu einem Sprung um die doppelte Fließgrenze. Die Abbildung 3.3 zeigt den Verlauf der Kennlinien bei Verwendung des Bingham-Modells.

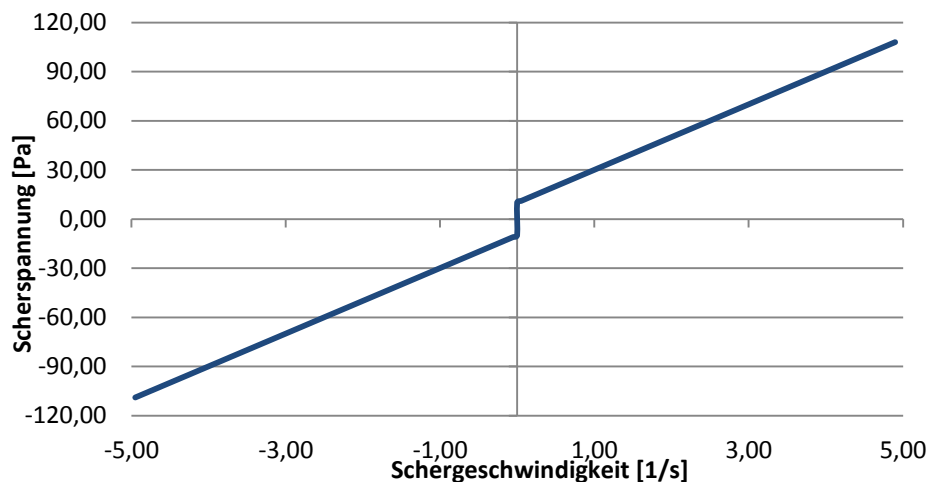


Abbildung 3.3: Kennlinienverlauf Bingham-Modell ($\sigma_0 = 10\text{Pa}$, $\eta = 10\text{Pa s}$)

Eine sehr allgemeine Erweiterung ist das Herschel-Bulkley-Modell [7], welches für fast alle Fluide verwendet werden kann. Nach dem Modell gilt zwischen Schub- bzw. Scherspannung und der Schergeschwindigkeit ein exponentieller Zusammenhang.

$$\sigma = \eta (\dot{\gamma})^{2n} + \sigma_0 \quad 3-5$$

Der Exponent n gibt Auskunft über den Verlauf der Kennlinie. Für $2n < 1$ erhält man ein scherverdünnendes Verhalten, für $2n > 1$ ein scherverdickendes Verhalten und für $2n = 1$ erhält man einen linearen Zusammenhang zwischen Schub- bzw. Scherspannung und Schergeschwindigkeit. Für $\sigma_0 = 0$ und $2n = 1$ erhält man ein Newton'sches Fluid, für

$\sigma_0 \neq 0$ und $2n = 1$ ein Bingham Fluid. Die Abbildung 3.4 zeigt den Verlauf der Kennlinie für das Herschel-Bulkley-Modell für verschiedene Exponenten n .

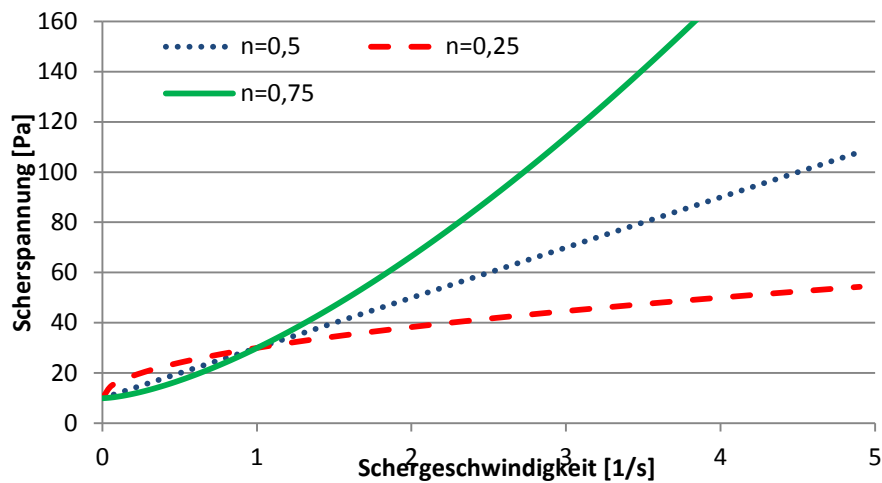


Abbildung 3.4: Kennlinienverlauf Herschel-Bulkley-Modell ($\sigma_0 = 10\text{Pa}$, $\eta = 20\text{Pa s}$, n -variabel)

Das letzte Modell, welches eingeführt werden soll, ist das Arkustangens-Modell [8]. Das Modell besteht aus zwei Teilen. Der erste Teil $\eta \dot{\gamma}$ beschreibt den linearen Zusammenhang zwischen Schub- bzw. Scherspannung und Schergeschwindigkeit, der sich beim Fließen einstellt. Der Teil $\frac{2\sigma_0}{\pi} \arctan\left(\frac{\dot{\gamma}}{b}\right)$ beschreibt die Fließgrenze des Fluids.

$$\sigma = 2\eta \dot{\gamma} + \frac{2\sigma_0}{\pi} \arctan\left(\frac{\dot{\gamma}}{b}\right) \quad 3-6$$

Das Arkustangens-Modell nutzt aus, dass der Arkustangens um den Nullpunkt stetig und punktsymmetrisch ist, was vorteilhaft in der Numerik ist. Für $b \rightarrow 0$ erhält man einen steilen Anstieg, sodass der Arkustangens schnell von 0 auf $\frac{\pi}{2}$ springt. Damit das Modell die Fließgrenze erreicht, muss der Arkustangens mit dem Faktor $\frac{2\sigma_0}{\pi}$ multipliziert werden. Die Abbildung 3.5 zeigt den Verlauf der Kennlinie für das Arkustangens-Modell.

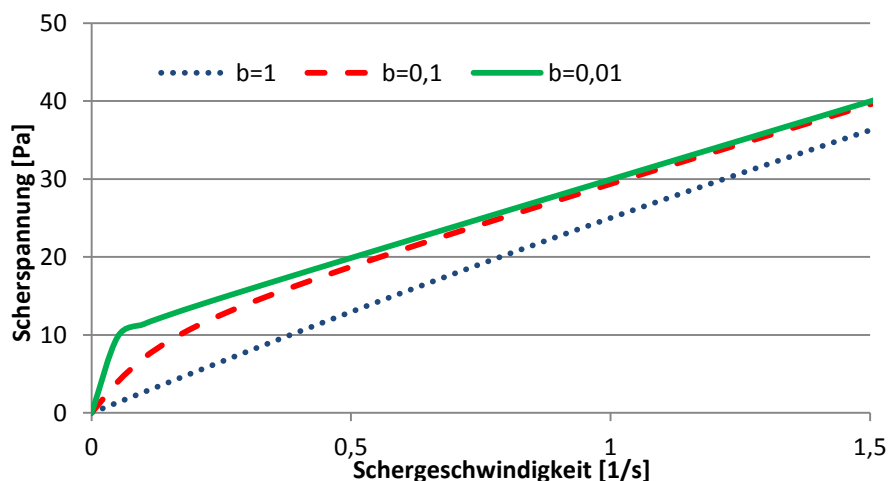


Abbildung 3.5: Kennlinienverlauf Arkustangens-Modell ($\sigma_0 = 10\text{Pa}$, $\eta = 10\text{Pa s}$, b -variabel)

3.2 Rheologie

Die Rheologie, die Lehre und Wissenschaft des Fließ- und Deformationsverhaltens [4][2], [17], [19], hat eine lange Geschichte, obwohl sie erst seit 1929 eine Wissenschaft ist. Der Begriff Rheologie ist abgeleitet vom griechischen "παντα ρει", was so viel bedeutet wie "alles fließt". Ein der wichtigsten Vordenker der Rheologie ist Sir Isaac Newton, der durch seine Definition des Widerstand eines idealen Fluids, was heute als Viskosität bezeichnet wird, den Grundstein für die Rheologie setzte. Hooke, Bernoulli, Cauchy sowie Navier und Stokes sind weitere Vordenker, auf deren Erkenntnissen unter anderen Bingham, Oldroyd, Herschel & Bulkley und Metzner ihre Theorien aufbauten. Die Abbildung 3.6 zeigt einen Überblick über relevante Arbeiten und damalige Modellvorstellungen zum Fluid.

FLUIDS/MODELS CLASS		KEY TIME	REPRESENTATIVE WORKS
Ideal materials	a) Perfect, rigid bodies	Anti-quity	Archimedes (~250 BCE), Newton (1687)
	b) Ideal elastic solids	1600s	Boyle (1660), Hooke (1678), Young (1807), Cauchy (1827)
	c) Inviscid fluids	1700s	Pascal (1663), Bernoulli (1738), Euler (1755)
	d) Newtonian liquids	Early 1800s	Newton (1687), Navier (1823), Stokes (1845), Hagen (1839), Poiseuille(1841), Weidemann (1856)
Linear viscoelasticity		Mid 1800s	Weber (1835), Kohrausch (1863), Wiechert (1893), Maxwell (1867), Boltzmann (1878), Poynting & Thomson (1902)
Generalized Newtonian (viscous) liquids		Late 1800s- Early 1900s	Schwedoff (1890), Trouton & Andrews (1904), Hatchek (1913), Bingham(1922), Ostwald (1925) - de Waele (1923), Herschel & Bulkley (1926)
Non-linear viscoelasticity		Early 1900s	Poynting (1913), Zaremba (1903), Jaumann (1905), Hencky (1929)
Key material descriptions	a) Suspensions	Early 1900s	Einstein (1906), Jeffrey (1922)
	b) Polymers		Schonbein (1847), Baekeland (1909), Staudinger (1920), Carothers (1929)
	c) Extensional viscosity		Barus (1893), Trouton (1906), Fano (1908), Tamman & Jenckel (1930)
The genesis of rheology		1929	Bingham, Reiner and others

Abbildung 3.6: Übersicht über rheologische Arbeiten vor 1926 [17]

Nach 1926 war die Rheologie stark durch die Kontinuumsmechanik beeinflusst, wodurch sich das Fließverhalten beschreiben ließ. Seit den 1960er Jahren werden vor allem FDM- und FEM-Simulationen durchgeführt, wodurch sich das rheologische Problem auf einen Satz simultaner, nichtlinearer Gleichungen an den Knotenpunkten reduzieren lässt.

In der Rheologie wird die Reaktion des Materials auf eine äußere Belastung untersucht. Dazu gehört die Bestimmung der Viskosität in Abhängigkeit der Scherrate bzw. Schergeschwindigkeit.

Für die Viskositätsbestimmung von Fluiden werden sogenannte Rheometer oder Viskosimeter verwendet. Diese erzeugen einen Geschwindigkeitsgradienten im Fluid, durch den die Viskosität bestimmt werden kann. Zur Viskositätsbestimmung eignen sich diverse Typen von Viskosimetern.

Eine Möglichkeit der Viskositätsbestimmung ist die Verwendung von Kapillarviskosimetern, siehe Abbildung 3.7. Dabei wird der Geschwindigkeitsgradient durch eine laminare Rohrströmung in einer Messkapillare erzeugt, wodurch sich ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil ausbildet. Entweder wird bei vorgegebener Druckdifferenz der Volumenstrom durch die Kapillare oder bei konstantem Volumenstrom die Druckdifferenz gemessen. Über das Hagen-Poiseuille'sche Gesetz kann dann die Viskosität bestimmt werden.

$$\dot{V} = \frac{\pi \cdot R^4 \cdot \Delta p}{8 \cdot L \cdot \eta} \quad 3-7$$

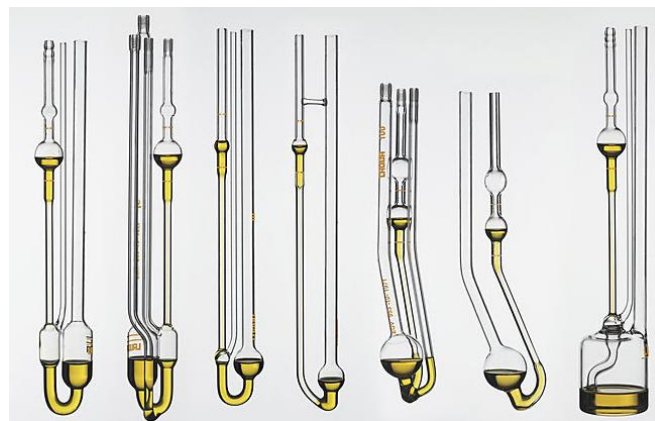


Abbildung 3.7: verschiedene Kapillarviskosimeter [9]

Eine andere Möglichkeit der Viskositätsbestimmung ist das Rotationsviskosimeter. Dabei wird der Geschwindigkeitsgradient durch die Rotation eines Drehkörpers im Fluid erzeugt. Die Abbildung 3.8 zeigt eine Auswahl von Rotationsviskosimetern.

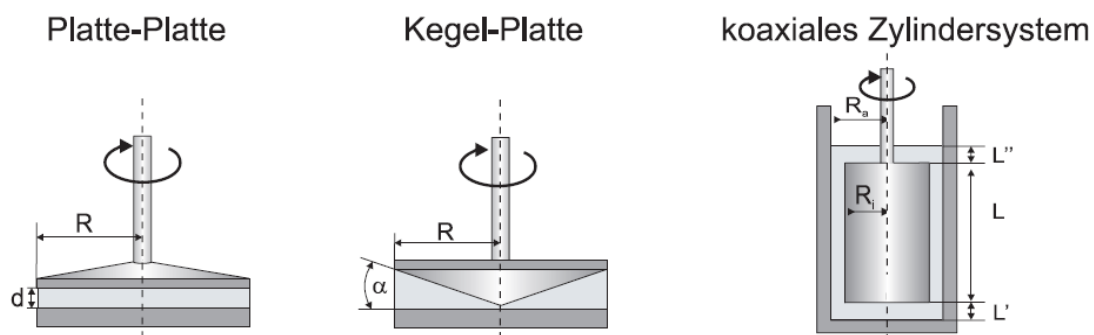


Abbildung 3.8: verschiedene Rotationsviskosimeter [4]

Rotationsviskosimeter unterscheiden sich in ihrer Geometrie. Das einfachste Rotationsviskosimeter ist das Platte-Platte-Viskosimeter, siehe Abbildung 3.9. Dabei wird das Fluid zwischen einer festen und einer drehbaren runden Platte eingebracht und rotiert.

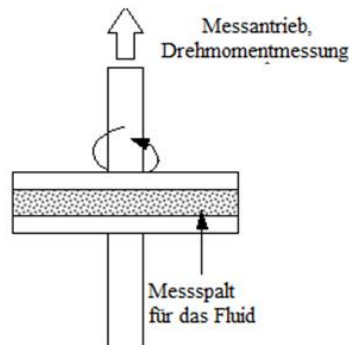


Abbildung 3.9: Platte-Platte-Viskosimeter, nach [10]

Beim Kegel-Platte-Viskosimeter, siehe Abbildung 3.10 wird statt der Platte eine Kegelform zum Übertragen der Rotationsbewegung verwendet. Dies hat den Vorteil, dass die Deformationsgeschwindigkeit auf der gesamten Kegelfläche konstant ist und damit eine homogene Deformation erreicht werden kann.

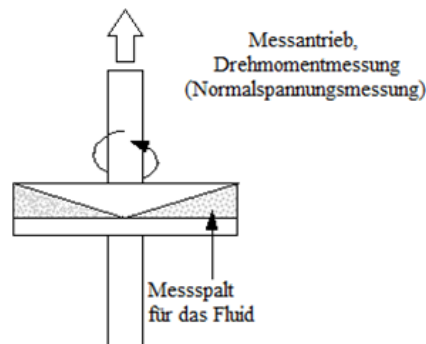


Abbildung 3.10: Kegel-Platte-Viskosimeter [11]

Bei Rotationsviskosimeter besteht die Möglichkeit zwischen der spannungsgesteuerten und der weggesteuerten Viskositätsmessung zu unterscheiden. Bei der spannungsgesteuerten Viskositätsmessung wird für vorgegebene Schub- bzw. Scherspannungen die Rotationsgeschwindigkeit der Platte bzw. des Kegels gemessen. Bei der weggesteuerten Viskositätsmessung wird stattdessen für feste Rotationsgeschwindigkeiten die benötigte Schub- bzw. Schubspannung gemessen. Für das Kegel-Platte-Viskosimeter wird die momentane Viskosität über folgende Gleichung bestimmt:

$$\eta = \frac{\sigma}{\dot{\gamma}} = \frac{3 \cdot M_d}{2 \cdot \pi \cdot R^3} \cdot \frac{\tan(\alpha)}{\omega} \quad 3-8$$

Andere Viskosimeter, die hier nur zur Vollständigkeit erwähnt werden, sind das Kugelfallviskosimeter, die Viskositätswaage und das Magnetoviskosimeter, die alle zu den Fallviskosimetern zählen, sowie das Schlitzrheometer und das Schmelzindex-Prüfgerät, die mit dem Kapillarviskosimeter zu den Druckviskosimetern zählen, cf. [12].

4 Viskositätsbestimmung von Zahnpasta

Das folgende Kapitel behandelt die Viskositätsbestimmung von Zahnpasta. Dabei werden zunächst Messergebnisse aus der Literatur vorgestellt, die als Grundlage für die in diesem Projekt getätigten Versuche gelten sollen. Anschließend wird der im Projekt verwendete Versuchsaufbau und das damit gefundene Messergebnis präsentiert.

4.1 Messergebnisse aus der Literatur

Auf Grund der großen Auswahl an Zahncremes, jeweils mit unterschiedlichen Eigenschaften und Bestandteilen, sind feste Werte für die Viskosität von Zahncreme kaum zu finden. So variiert die Viskosität von Zahncreme in der Literatur zwischen 70.000 mPa s [13] und 140.000 mPa s [15]. Damit ist Zahncreme deutlich zähflüssiger als z.B. Wasser (1 mPa s), Milch (20 mPa s) oder Öl (80 mPa s) und liegt im Bereich von Handcreme, Joghurt und Senf (90.000 mPa s bis 150.000 mPa s) [15].

Trotzdem lässt sich Zahncreme als ein Fluid mit relativ geringer Viskosität einordnen. Fluide wie Teer (100.000 mPa s), Beton oder Druckfarben ($10.000.000 \text{ mPa s}$) besitzen eine deutlich höhere Viskosität als Zahncreme [13].

Auch zur Fließgrenze von Zahncreme lassen sich in der Literatur Werte finden. So besitzt die Zahncreme „Colgate“ eine Fließgrenze von $2,1 \text{ Pa}$ [7], wobei die Viskositätsbestimmung bei einer Temperatur von 25 Grad Celsius und unter Verwendung eines Kegel-Platte-Viskosimeters mit einem Durchmesser von 60 mm und einer Schräge von 4° durchgeführt wurde.

Sowohl für die Viskositätsbestimmung als auch für die Simulation ist es notwendig, die Dichte von Zahncreme zu wissen. In der Literatur finden sich kaum Werte für die Dichte einzelner Zahncremesorten finden. Allgemein lässt sich für Zahncreme mit einer Dichte von $1,2 - 1,6 \text{ kg/m}^3$ [16]. Damit ist die Dichte von Zahncreme etwas höher als die von Wasser.

4.2 Versuchsaufbau

Für die Viskositätsbestimmung von Zahncreme wird das Rotationsviskosimeter AR1000 der Firma TA Instruments verwendet. Das Rotationsviskosimeter besteht aus einem Messgerät und einem Wassertank mit einer Heizung zur Temperatureinstellung des Messplatzes. Die Abbildung 4.1 zeigt den Aufbau des Rotationsviskosimeters.



Abbildung 4.1: Messaufbau Rotationsviskosimeter

Wie im Abschnitt 3.2 erläutert, ist das zu vermessene Fluid entscheidend für die Wahl der Geometrie der Messplatte des Viskosimeters. So eignen sich Platte-Platte-Viskosimeter für fast alle Fluide, wohingegen für die Verwendung von Kegel-Platte-Viskosimetern inkompressible Fluide vorliegen müssen [18].

Wie bereits erwähnt, kann Zahncreme als inkompressibles Fluid angenommen werden. Entsprechend wird für die Viskositätsmessung ein Kegel-Platte-Viskosimeter verwendet.

Die erwartete Viskosität des Fluids ist ein entscheidendes Kriterium für die Wahl des Durchmessers für den Kegel. Die Empfehlung des Viskosimeter-Herstellers lautet: Je geringer die Viskosität des Fluids, desto größer der verwendete Durchmesser des Kegels. Durch die Wahl eines kleinen Kegelwinkels lässt sich die Höhe der maximal erreichbaren Schergeschwindigkeit regulieren.

Aus den Angaben in der Literatur, siehe Abschnitt 4.1, wird deutlich, dass für Zahncreme eine relativ niedrige Viskosität zu erwarten ist. Daher wird ein großer Kegel mit einem Durchmesser von 60 mm verwendet. Die Abbildung 4.2 zeigt den verwendeten Kegel-Platte-Aufbau in angehobenem Zustand.

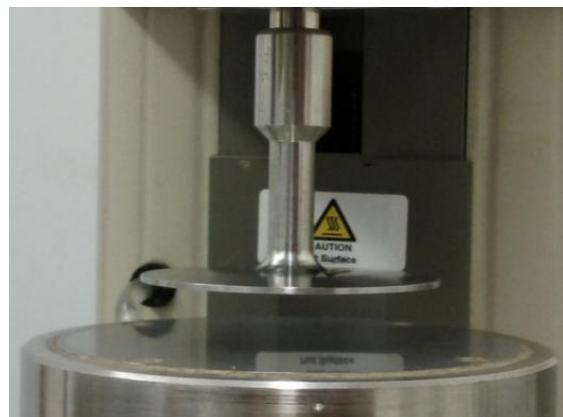


Abbildung 4.2: Kegel-Platte-Viskosimeter mit hochgefahrenem Kegel

Für die Viskositätsbestimmung ist zunächst eine Kalibrierung der Maschine notwendig. Dazu gehört die Kalibrierung des Drehmoments, der Drehgeschwindigkeit, der Temperatur und der Spaltgröße.

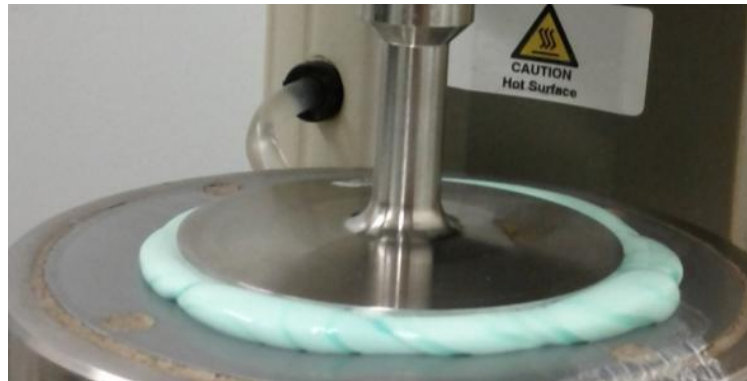


Abbildung 4.3: Herunterfahren des Kegels

Nach der Kalibrierung wird der Kegel in höchste Position gefahren, sodass ausreichend Platz vorhanden ist, um die Zahncreme auf die Platte aufzutragen. Daraufhin wird der Kegel langsam bis zur Endposition heruntergefahren. Dabei drückt sich die überflüssige Zahncreme selbstständig heraus, siehe Abbildung 4.3. Für eine genaue Viskositätsbestimmung muss die überflüssige Zahncreme entfernt werden. Die Abbildung 4.4 zeigt die korrekte Füllmenge. Es ist anzumerken, dass zu wenig Zahncreme eine größere Auswirkungen auf die Genauigkeit der Viskositätsbestimmung hat als zu viel Zahncreme [14].

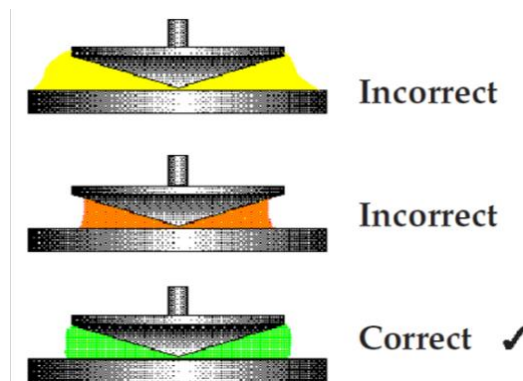


Abbildung 4.4: korrekte Füllmenge zur Viskositätsbestimmung [14]

Als Nächstes erfolgt die Eingabe der Dichte der Zahncreme, siehe Abschnitt 4.1, sowie die Auswahl des Messverfahrens. Zunächst lässt sich zwischen einer kontinuierlichen, bei der eine Fließkurve in Abhängigkeit von einer Schergeschwindigkeit (weggesteuerte Messung) oder einer Scherspannung (spannungsgesteuerten Messung) aufgenommen wird, und einer dynamischen Messung, bei der eine sinusförmige Scherspannung aufgebracht wird, auswählen.

Im Experiment wird eine kontinuierliche Messung unter Vorgabe einer Scherspannung durchgeführt. Damit wird gewährleistet, dass der erwartete Knick bei der Fließgrenze genau erfasst werden kann.

4.3 Messergebnisse

Im Experiment werden verschiedene Zahncremesorten ("Colgate", "Signal") und als Vergleich die Handcreme ("Nivea") untersucht. Die Abbildung 4.5 zeigt den Vergleich der Fließkurven zwischen der "Signal"-Zahncreme und der "Colgate"-Zahncreme. Dabei ist zu beobachten, dass die beiden Zahncremes für Schergeschwindigkeiten zwischen $0,01 \frac{1}{s}$ und $0,05 \frac{1}{s}$ gleich verlaufen und erst dann "Signal" deutlich stärker ansteigt als "Colgate".

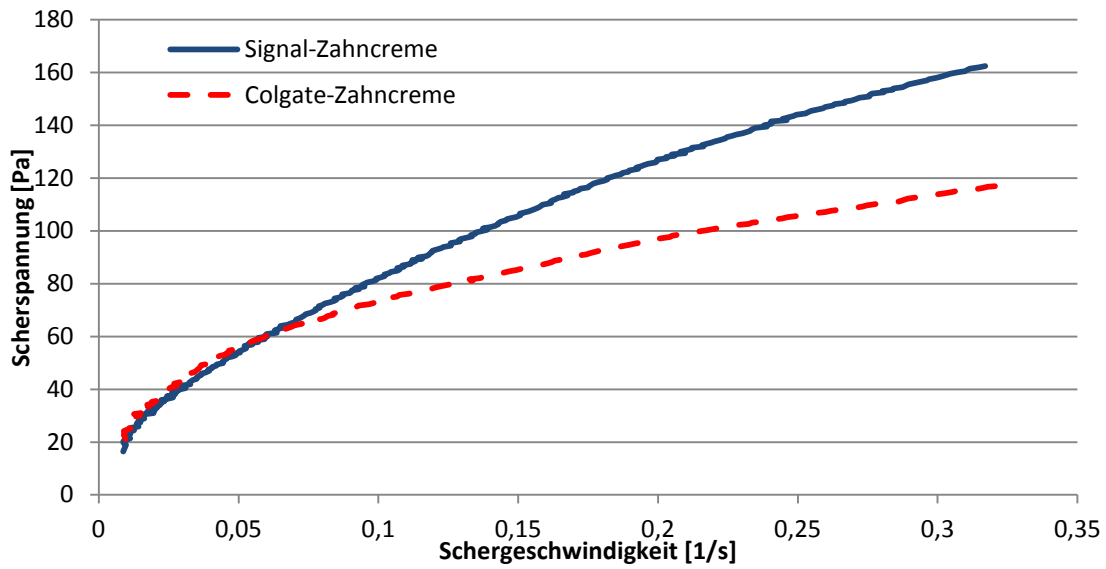


Abbildung 4.5: Vergleich Zahncreme "Signal" und "Colgate"

Des Weiteren ist festzustellen, dass unterhalb einer Schergeschwindigkeit von $0,01 \frac{1}{s}$ keine Messwerte aufgenommen wurden. Dies kann mit der Maschinengenauigkeit bzw. -auflösung zusammenhängen.

Die in Abschnitt 4.2 erwähnte Bedeutung der richtigen "Befüllung" des Viskosimeters ist in Abbildung 4.6 zu erkennen. Bei korrekter "Befüllung" verläuft die Fließkurve deutlich niedriger als bei zu großer Füllmenge. Dies hängt damit zusammen, dass auf die überflüssige Zahncreme keine Scherspannung wirkt und somit verlangsamt auf die Scherung der restlichen Zahncreme wirkt.

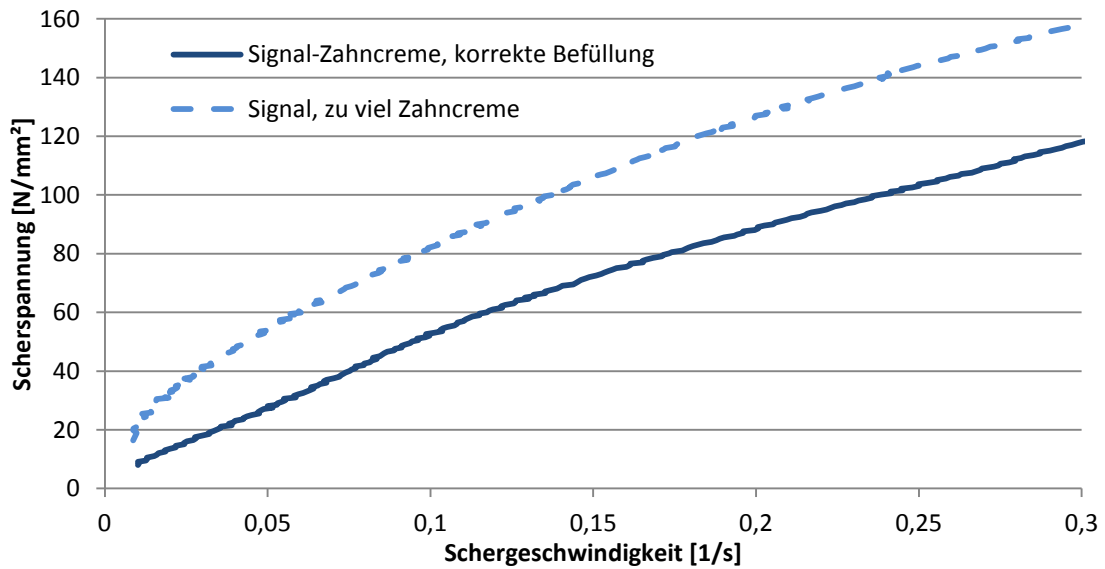


Abbildung 4.6: Messung Zahncreme "Signal", Unterschied durch Befüllung

Den Vergleich zwischen Zahncreme und Handcreme zeigt die Abbildung 4.7. Dabei ist festzustellen, dass die "Nivea"-Creme eine deutlich niedrigere Fließkurve aufweist als die "Signal"-Zahncreme.

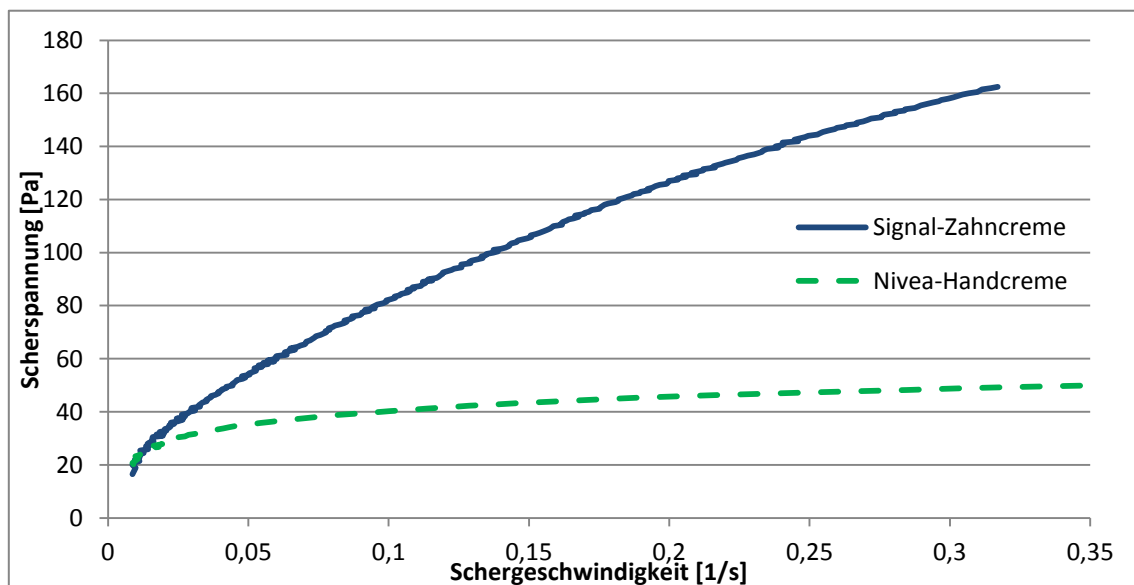


Abbildung 4.7: Messung Zahncreme "Signal" und Handcreme "Nivea"

5 Fit zwischen Messwerten und Spannungsmodellen

In diesem Kapitel werden die in Abschnitt 3.1.2 eingeführten Modelle für Bingham-Fluide auf die Messergebnisse angewendet und "gefittet", sodass die optimalen Parameter ermittelt werden. Dazu wird der Levenberg-Marquardt-Algorithmus verwendet. Dies ist ein numerischer Optimierungsverfahren zum Lösen nichtlinearer Ausgleichsprobleme unter Anwendung Methode der kleinsten Fehlerquadrate.

Die Modelle für Bingham-Fluide werden auf die Fließkurve der "Signal"-Zahncreme angewendet. Für die Fließkurve von "Signal"-Zahncreme erhält man für alle Modelle positive Parameter, sodass diese auch für die Simulation verwendet werden können.

Für das Bingham-Modell, siehe Abbildung 5.1, erhält man eine lineare Kennlinie mit einer Nullpunktverschiebung. Die Scherspannung der "Signal"-Zahncreme lässt sich nach dem Bingham-Modell optimal wie folgt berechnen:

$$\sigma = 461,79\text{Pa s} \cdot \dot{\gamma} + 30,28\text{Pa}. \quad 5-1$$

Wie jedoch in der Abbildung zu erkennen, spiegelt das Modell die Fließkurve der "Signal"-Zahncreme nicht exakt wieder. Die mittlere Varianz beträgt für das Bingham-Modell 19,425Pa.

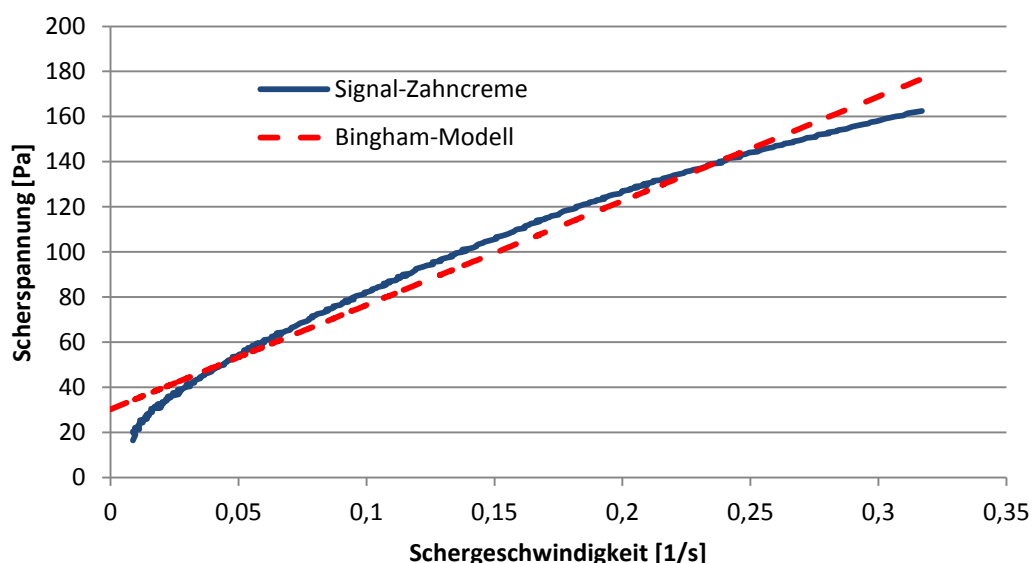


Abbildung 5.1: Fit Messung und Bingham-Modell

Für das Herschel-Bulkley-Modell, siehe Abbildung 5.2, erhält man einen Kurvenverlauf, die der Fließkurve der "Signal"-Zahncreme sehr genau entspricht. Mit folgender Gleichung lässt sich die Zahncreme optimal mit dem Herschel-Bulkley-Modell beschreiben:

$$\sigma = 328,47\text{Pa s} \cdot (\dot{\gamma})^{0,5996} + 0,2135\text{Pa}. \quad 5-2$$

Wie bereits erwähnt, stimmen die Fließkurve der "Signal"-Zahncreme und das Herschel-Bulkley-Modell sehr gut überein. die mittlere Varianz beträgt 0,538Pa.

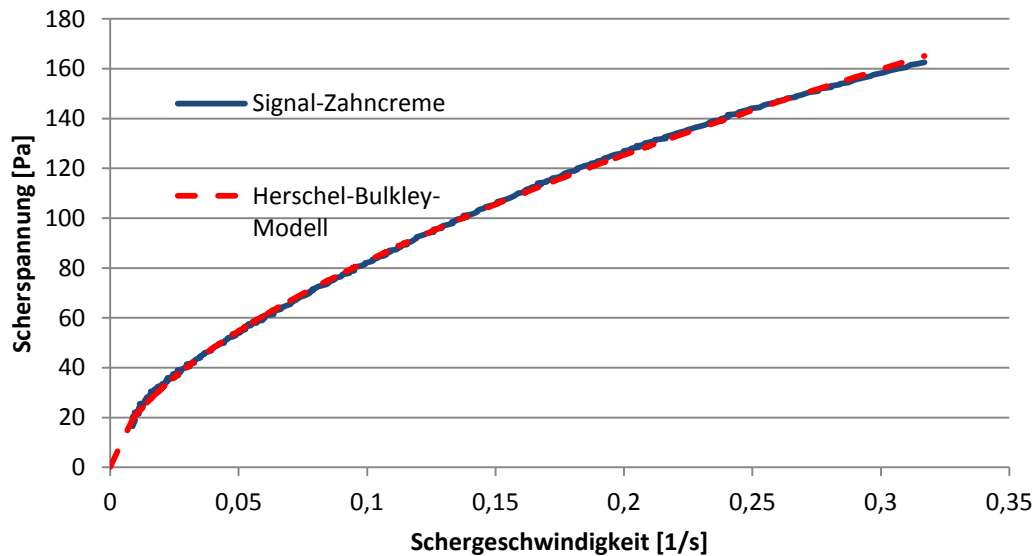


Abbildung 5.2: Fit Messung und Herschel-Bulkley-Modell

Mit dem Arkustangens-Modell, siehe Abbildung 5.3, erhält man einen Kurvenverlauf, die die Fließkurve der "Signal"-Zahncreme genau beschreibt, allerdings zu Beginn und am Ende der Kurve Fehler aufweist. Mit folgender Gleichung lässt sich die Zahncreme optimal mit dem Arkustangens-Modell beschreiben:

$$\sigma = 374,46 \text{ Pa s} \cdot \dot{\gamma} + \frac{106,85 \text{ Pa}}{\pi} \cdot \arctan\left(\frac{\dot{\gamma}}{0,02441}\right). \quad 5-3$$

Die mittlere Varianz für das Arkustangens-Modell beträgt 3,08 Pa.

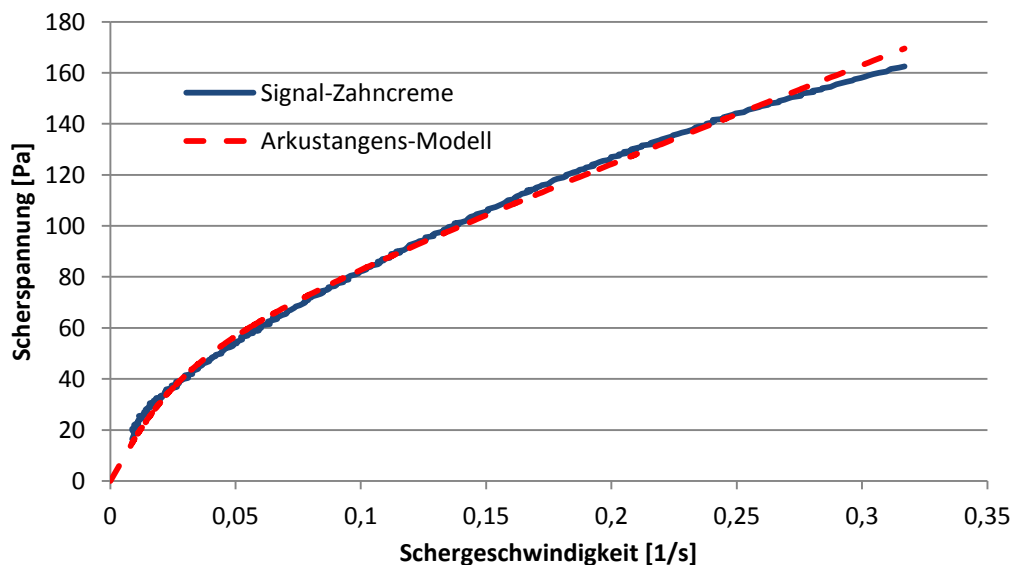


Abbildung 5.3: Fit Messung und Arkustangens-Modell

Insgesamt lässt sich mit den 1D-Modellen für Bingham-Fluide die Fließkurve der "Signal"-Zahncreme sehr genau beschreiben, wobei das Herschel-Bulkley-Modell die beste Übereinstimmung mit der Fließkurve hat. Ein linearer Ansatz wie im Bingham-Modell ist nicht optimal.

6 Simulation

Wie bereits im Kapitel 2 erwähnt, soll mit Hilfe des frei-verfügbaren Software-Pakets FEniCS-Projekt eine Simulation des Experiments zur Viskositätsbestimmung durchgeführt werden.

Dafür werden zunächst die Kontinuumsgleichung aus der Massen- und Impulsbilanz hergeleitet. Anschließend werden die Gleichungen in eine Form gebracht, die eine numerische Lösung der Gleichungen ermöglicht. Dazu wird ein Minimierungsproblem formuliert. Des Weiteren muss eine Zeitdiskretisierung und Linearisierung durchgeführt werden. Als Letztes ist die Definition des zu simulierenden Gebietes und der auftretenden Lasten sowie der Anfangs- und Randbedingungen notwendig.

6.1 Bilanzgleichung

Mit Hilfe von Erhaltungssätzen lassen sich Bilanzgleichungen aufstellen, durch die dann die unbekanntenen Größen bestimmt werden können. Es werden vorwiegend die Erhaltungssätze für die Masse bzw. Massendichte, Impuls und Energie verwendet.

Allgemein sieht eine Bilanzgleichung einer konvektiven Größe χ für ein offenes System unter Anwendung der Einstein'schen Summenkonvention wie folgt aus:

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \chi \, dV = - \oiint_{\partial V} \chi v_i n_i \, dA + \oiint_{\partial V} \phi_i n_i \, dA + \iiint_V f \, dV. \quad 6-1$$

Die zu bilanzierende Größe χ ändert sich, durch einen konvektiven Fluss, das heißt, wenn über die Systemgrenzen (Oberfläche) etwas hinzukommt bzw. verloren geht. Außerdem ändern nicht-konvektive Flüsse ϕ_i und volumetrische Größen f die zu bilanzierende Größe.

Je mehr unabhängige Bilanzgleichungen aufgestellt werden, desto mehr Unbekannte lassen sich bestimmen. In diesem Projekt werden mit Hilfe der Massen- und Impulsbilanz vier Felder, die Dichte und der Geschwindigkeitsvektor bestimmt.

6.1.1 Massenbilanz

Die Masse eines Systems ergibt sich aus der Summe der einzelnen Masseteilchen dm im System. Die Masse dieser Teilchen kann über deren Dichte ρ und deren Volumen dV bestimmt werden.

$$M = \int_M dm = \iiint_V \rho \, dV. \quad 6-2$$

Die Masse in einem offenen System ändert sich, wenn Masseteilchen über die Oberfläche des Systems ein- bzw. austreten.

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho \, dV = - \oiint_{\partial V} \rho \, v_i \, n_i \, dA. \quad 6-3$$

Durch den Gauß'schen Satz lässt sich ein Oberflächenintegral in ein Volumenintegral umschreiben. Die Formel lautet dafür:

$$\oiint (f \, n_i) \, ds = \iiint \frac{\partial f}{\partial x_i} \, dV. \quad 6-4$$

Unter Anwendung des Gauß'sche Satz ergibt sich für die Massendichte:

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho \, dV = - \iiint_V \frac{\partial(\rho \, v_i)}{\partial x_i} \, dV. \quad 6-5$$

Das vollständige Differential lässt sich umformen in die Summe seiner partiellen Ableitungen.

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{dx_i}{dt} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad 6-6$$

Der Term $\frac{\partial x_i}{\partial t}$ entspricht der Abbildungsgeschwindigkeit w_i . Die Abbildungsgeschwindigkeit ist die Geschwindigkeit, mit der sich die räumliche Position verändert. Es gilt weiterhin:

$$\frac{d}{dt} dV = \frac{\partial w_i}{\partial x_i} dV. \quad 6-7$$

Für die Massendichte ergibt sich damit folgender Ausdruck:

$$\iiint_V \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho + w_i \frac{\partial}{\partial x_i} \rho + \rho \frac{\partial w_i}{\partial x_i} \right) dV = - \iiint_V \frac{\partial(\rho \, v_i)}{\partial x_i} \, dV. \quad 6-8$$

6.1.2 Impulsbilanz

Der Impuls setzt sich aus der Summe der Einzelimpulse über die gesamte Masse des Systems zusammen, wobei jeder Einzelimpuls das Produkt aus seiner Geschwindigkeit und Masse ist. Entsprechend lässt sich der Gesamtimpuls eines Systems wie folgt schreiben:

$$P_i = \int_M dp_i = \int_M v_i \, dm = \iiint_V \rho \, v_i \, dV. \quad 6-9$$

Eine Impulsänderung in einem offenen System kann sich durch äußere Kräfte oder Konvektion des Impulses über die Oberfläche ergeben.

Die Kräfte auf das System werden in Oberflächenkräfte T_i und Volumenkräfte F_i unterschieden.

Die Oberflächenkraft T_i ergibt sich aus der Spannung, die auf die Oberfläche wirkt. Der Cauchy'sche Spannungstensor σ_{ji} ist der aktuelle Spannungstensor auf die Flächennormalen n_j .

$$T_i = \oint_{\partial V} t_i \, dA = \oint_{\partial V} n_j \sigma_{ji} \, dA. \quad 6-10$$

Der Spannungstensor ist materialabhängig, das heißt, er ist maßgeblich entscheidend, wie sich der Impuls des Fluids beim Einwirken einer Kraft ändert. Im Kapitel 3.1.2 wurden bereits Modelle vorgestellt, mit denen der Spannungstensor in 1D beschrieben werden kann.

Volumenkräfte sind Kräfte, die auf das gesamte Volumen wirken. Entsprechend lässt sich eine Volumenkraft F_i als Summe von vielen Kräften darstellen, die auf jedes Volumenelement dV wirken. Ein Beispiel für eine Volumenkraft ist die Gravitationskraft.

$$F_i = \int_M g_i \, dm = \iiint_V \rho g_i \, dV. \quad 6-11$$

Unter Verwendung der genaueren Beschreibung der Oberflächen- und Volumenkräfte lässt sich die Impulsbilanz durch folgenden Ausdruck beschreiben:

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho v_i \, dV = - \oint_{\partial V} v_j \rho v_i n_j \, dA + \oint_{\partial V} \sigma_{ji} n_j \, dA + \iiint_V \rho g_i \, dV. \quad 6-12$$

Mit dem Gauß'schen Satz lassen sich die Oberflächenintegrale wieder in Volumenintegrale umschreiben.

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \rho v_i \, dV = - \iiint_V \frac{\partial(v_j \rho v_i)}{\partial x_j} \, dV + \iiint_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \, dV + \iiint_V \rho g_i \, dV. \quad 6-13$$

Wird das totale Differential durch seine partiellen Ableitungen ersetzt, so ergibt sich folgender Ausdruck für die Impulsbilanz.

$$\iiint_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + w_i \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i) + \rho v_i \frac{\partial w_k}{\partial x_k} \right) dV = - \iiint_V \left(\frac{\partial}{\partial x_j} (v_j \rho v_i - \sigma_{ji}) + \rho g_i \right) dV. \quad 6-14$$

6.2 Annahmen und Vereinfachungen

Zur Vereinfachung der Gleichungen werden einige Annahmen getroffen. Es wird in diesem Projekt angenommen, dass das System isotherm ist, das heißt, dass bei der Scherung des Fluids keine Produktion der inneren Energie stattfindet. Diese Annahme ist eine sehr starke Vereinfachung, jedoch wird in diesem Projekt eine so geringe Schergeschwindigkeit betrachtet, dass die Temperaturänderung zu vernachlässigen ist.

Des Weiteren wird angenommen, dass die Gravitation und andere Volumenkräfte keinen Einfluss haben. Auch diese Annahmen lassen sich mit der geringen Schergeschwindigkeit begründen.

Als Letztes wird angenommen, dass das verwendete Fluid inkompressibel ist, das heißt, dass die Dichte in der Zeit und im Raum konstant ist. Wie bereits im Kapitel 3.1.1 gezeigt, ist diese Annahme für Zahncreme zulässig.

Im Projekt wird mit der Euler'schen Betrachtungsweise gearbeitet. Sie beschreibt die Zustände jeweils an einem festen Ort und zu einem festen Zeitpunkt (Orts- und Zeitfunktion in Raumkoordinaten). Anders als bei der Lagrange'schen Betrachtungsweise, bei der das Teilchen entlang seines Weges beschrieben wird, gibt es bei der Euler'schen Betrachtungsweise keine Abbildungsgeschwindigkeit ($w_i = 0$).

Aus den Annahmen und Vereinfachungen ergeben sich folgende Bilanzgleichungen. Für die Massendichte vereinfacht sich der Ausdruck dahin, dass die Beobachtergeschwindigkeit w_i gleich Null gesetzt wird. Des Weiteren lässt sich die Dichte ρ aus den Integralen ziehen, da es zeitlich und im Ort konstant ist.

$$\iiint_V \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} dV = 0. \quad 6-15$$

Für die Impulsbilanz verschwinden ebenfalls die Terme mit der Abbildungsgeschwindigkeit w_i . Außerdem entfällt der Term mit den Volumenkräften.

$$\iiint_V \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} dV = \iiint_V \left(\frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} - \rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} v_k + v_i \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) \right) dV. \quad 6-16$$

Für ein sehr kleines Volumen erhält man die lokale Form der Massendichte- und Impulsbilanz.

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0. \quad 6-17$$

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji}) - \rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} v_k + v_i \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right). \quad 6-18$$

6.3 Variationelle Formulierung der Gleichung

Um die Bilanzgleichungen mit Hilfe einer FEM-Berechnung lösen zu können, muss zunächst ein Minimierungsproblem aufgestellt werden. Dazu werden alle Terme der Bilanzgleichungen auf eine Seite gebracht.

Ziel des Minimierungsproblems, welches mit FEM-Berechnung gelöst werden soll, ist es, Werte für die unbekanntenen Größen zu finden, für die die Gleichungen erfüllt bzw. minimiert werden.

$$\iiint_V \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} dV = 0. \quad 6-19$$

$$\iiint_V \left(\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} v_k + v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji}) \right) dV = 0. \quad 6-20$$

Mit Hilfe der variationellen Formulierung lässt sich eine im gesamten System stetige Lösung finden. Dies wird erreicht, indem die Gleichung 6-19 mit der Testfunktion $\delta\rho$ und die Gleichung 6-20 mit der Testfunktion δv_i multipliziert wird. Man erhält:

$$\iiint_V \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \delta\rho dV = 0. \quad 6-21$$

$$\iiint_V \left(\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} v_k + v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji}) \right) \delta v_i dV = 0. \quad 6-22$$

Da beide Bilanzgleichungen Null ergeben sollen, ändert es am Ergebnis nichts, wenn man sie in einer Gleichung zusammenfasst. Man erhält dadurch folgenden Ausdruck:

$$\iiint_V \left(\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} \delta\rho + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \delta v_i + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} v_k \delta v_i + v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta v_i \right) - \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \delta v_i \right) dV = 0. \quad 6-23$$

Durch die teilweise partielle Integration und die Ausnutzung des Satz von Gauß lässt sich verhindern, dass der Spannungstensor abgeleitet wird, wodurch deren Informationen verloren gehen würden. Dafür wird zunächst die partielle Integration aufgestellt:

$$\iiint_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \delta v_i dV = - \iiint_V \sigma_{ji} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta v_i dV + \iiint_V \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ji} \delta v_i) dV. \quad 6-24$$

Unter Ausnutzung des Satz von Gauß wird aus dem Volumenintegral ein Oberflächenintegral.

$$\iiint_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} \delta v_i dV = - \iiint_V \sigma_{ji} \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} dV + \iint_{dV} \sigma_{ji} \delta v_i n_j dA \quad 6-25$$

Es kann dadurch verhindert werden, dass eine Variable abgeleitet wird, indem eine andere Variable ableitet. In diesem Fall wird die Testfunktion δv_i anstatt des Spannungstensors differenziert. Für das Minimierungsproblem ergeben sich dadurch ein Volumen- und ein Oberflächenintegral.

$$\iiint_V \left(\rho \left(\frac{\partial v_i}{\partial t} \delta\rho + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \delta v_i + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} v_k \delta v_i + v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta v_i \right) + \sigma_{ji} \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} \right) dV - \iint_{dV} (\sigma_{ji} \delta v_i n_j) dA = 0 \quad 6-26$$

6.4 Zeitdiskretisierung und Linearisierung

Um einen dynamischen Prozess mit einem FEM-Programm simulieren zu können, muss die Zeit in diskrete Zeitschritte unterteilt werden. Dies geschieht über die Rückwärts-Euler-Methode. Dafür wird die partielle Ableitung nach der Zeit für kleine Zeitschritte Δt mit dem Differenzenquotienten approximiert. Dabei wird der vorherige Wert vom aktuellen Wert abgezogen und durch den Zeitschritt Δt geteilt.

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = \frac{v_i - v_i^0}{\Delta t}. \quad 6-27$$

Man erhält:

$$\iiint_V \left(\rho \left(\frac{v_i - v_i^0}{\Delta t} \delta \rho + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \delta v_i + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} v_k \delta \varphi_i + v_j \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta v_i \right) + \sigma_{ji} \frac{\partial \delta v_i}{\partial x_j} \right) dV - \iint_{dV} (\sigma_{ji} \delta v_i) dA = 0. \quad 6-28$$

Um die Lösbarkeit einer Differentialgleichung garantieren zu können, muss sie linear sein, das heißt, sie muss sich in der Form $A\vec{x} = \vec{b}$ darstellen lassen. Nichtlineare Gleichungssysteme lassen sich allerdings mit der Newton-Raphson-Methode linearisieren. Dabei wird eine Taylor-Entwicklung für die Richtungsableitung entlang jeder Variablen bis hin zur ersten Ableitung durchgeführt. Höhere Ableitungen werden vernachlässigt. Durch die Linearisierung wird das Gleichungssystem lösbar und die Lösung wird auf Grund der Betrachtung der 1. Ableitung, stetig in den Knoten.

6.5 Formulierung der Randbedingungen

Im vorangegangenen Abschnitt 4.2 wurde ein Versuchsaufbau beschrieben, welchen die Simulation bestmöglich beschreiben soll. An dieser Stelle wird nun ein Modell eingeführt, das gegenüber dem Versuch um eine Dimension reduziert ist. Eine zweidimensionale Simulation hat den Vorteil, dass die zuvor eingeführten Bilanzgleichungen ohne eine Veränderung, wie z.B. die Einführung von Stabilitätsthermen, verwendet werden können. Außerdem verringert sich der Rechenaufwand wesentlich und ermöglicht kostengünstiges Experimentieren mit Materialgesetzen und -parametern. Für viele Versuchsaufbauten kann der Verlust der dritten Dimension ein entscheidender Nachteil sein, doch lässt sich dieser Versuch leicht nach 2D überführen. Die Abbildung 6.1 stellt den Versuch und den daraus betrachteten zweidimensionalen Teil der Simulation dar.

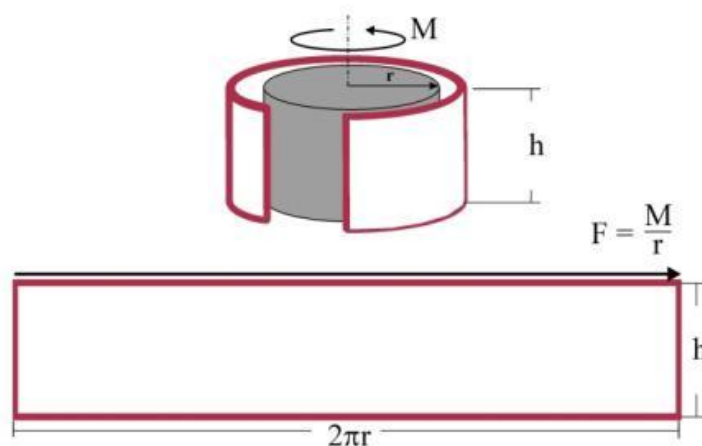


Abbildung 6.1: Überführung des Versuches in eine 2D-Simulation

Aus dem Versuch kann ein beliebiger Radius gewählt werden, für den ein sehr dünner Ring über die gesamte Höhe und alle Winkel von 0° bis 360° betrachtet wird. Diese Hülle kann nun aufgeklappt und als zweidimensional betrachtet werden. Die Länge in x-Richtung entspricht dem Umfang bei gewähltem Radius, wobei die y-Komponente die Höhe der Probe zwischen Boden und Drehteller besitzt. Die Unterseite dieses Streifens, gleichzeitig $y = 0$, wird wie auch im Versuch fixiert, sodass Geschwindigkeiten in jegliche Richtungen verhindert werden. Eine solche Randbedingung wird als Dirichlet-Bedingung bezeichnet und kann in der Simulation direkt in die Matrix des zu lösenden Gleichungssystems geschrieben werden. In die Simulation geht sie wie in Gleichung 6-29 beschrieben ein. Die Variable \hat{v}_i stellt diejenige Geschwindigkeit dar, die an dem betrachteten Rand gilt.

$$RB_{\text{Dirichlet}} = \partial\Omega_{\text{unten}}, \quad v_i = \hat{v}_i \quad 6-29$$

Das Moment, welches im Versuch von dem Drehteller übertragen wird, kann auf ähnliche Weise überführt werden. Für einen konstanten Radius unter beliebigen Winkeln wirkt eine vorgegebene Kraft, die sich in der Ebene des Drehtellers befindet und immer tangential zu der Probe steht. Die Kraft ergibt sich als Quotienten aus Moment und dem betrachteten Radius. Für die Simulation bedeutet dies, dass die Kraft entlang des oberen Randes $y = h$ verläuft und als Neumann-Bedingung mit in die Form aufgenommen werden muss. Ausgedrückt werden kann diese Randbedingung durch die Gleichung 6-31, wobei $\hat{\sigma}_{ij}$ einen zeitabhängigen Spannungstensor entspricht, der mit der Flächennormalen multipliziert, den Spannungsvektor (traction-vector) darstellt.

$$RB_{\text{Neumann}} = \partial\Omega_{\text{oben}}, \quad n_i \sigma_{ij} = \hat{t}_j \quad 6-30$$

Damit folgt für die Form die schwache Formulierung:

$$RB_{\text{Neumann}} = \int_{\partial\Omega_{\text{oben}}} (n_i \sigma_{ij} - \hat{t}_j) \delta v_j dA. \quad 6-31$$

Die letzte Randbedingung, die eingeführt werden sollte, ist periodisch. Das bedeutet, dass die Geschwindigkeiten am rechten Rand den Geschwindigkeiten am linken Rand entsprechen. Die periodische Randbedingung ergibt sich durch das Aufklappen der Hülle. Ist die

Ausdehnung in x-Richtung jedoch ausreichend groß und wird zudem nur der mittlere Ausschnitt der Simulation betrachtet, kann die periodische Randbedingung vernachlässigt werden.

6.6 Spannungsmodelle

In Kapitel 3.1.2 wurden Spannungsmodelle eingeführt, die an dieser Stelle genauer beschrieben werden sollen. Es handelt sich bei einem Spannungsmodell um eine Funktion, welche einen Zusammenhang zwischen der Schergeschwindigkeit und der Scherspannung darstellt. Das Aussehen des Spannungsmodells kann beliebig kompliziert sein, wobei die verwendeten Konstanten materialspezifisch sind. In Kapitel 3.1.2 wurden bereits das Bingham-Modell, das Arkustangens-Modell und das Herschel-Bulkley-Modell in der eindimensionalen Form eingeführt.

Da der Versuch unter realen Bedingungen stattfindet, sind die bisher aufgezählten Modelle ohne entsprechende Interpretationen und Überführungen auf höhere Dimensionen nicht hilfreich. Ein bekanntes und in der Strömungsmechanik häufig angewandtes Modell für Newton'sche Fluide ist das Navier-Stokes-Modell, siehe Gleichung 6-32. Es lässt aufgrund seiner Mehrdimensionalität Rückschlüsse auf das Aussehen der in Abschnitt 3.1.2 nur eindimensional beschriebenen Spannungsgleichungen zu.

$$\sigma_{ij} = \left(-p + \lambda \frac{\partial v_k}{\partial x_k}\right) \delta_{ij} + 2\eta \frac{\partial v_{(k}}{\partial x_{j)}} , \quad \frac{\partial v_{(k}}{\partial x_{j)}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \right) \quad 6-32$$

Auf diese Weise ist es möglich ähnliche Modelle aufzustellen und zu begründen. Da eine Überführung der eindimensionalen Gleichungen in mehrdimensionale weiterhin auf verschiedene Lösungen führen kann, ist deren Eignung durch Versuche zu überprüfen. Die als erstes betrachteten und implementierten Modelle sind die des Bingham- und Arkustangens-Modells. In beiden Fällen soll die Fließspannung nur in die Richtung des Geschwindigkeitsgradienten eingeführt werden, damit ergeben sich die nachfolgenden Gleichungen.

Für das Bingham-Modell ergibt sich:

$$\sigma_{kj} = 2\eta d_{kj} + \frac{\sigma_Y}{\sqrt{d_2}} d_{kj}. \quad 6-33$$

Für das Arkustangens-Modell ergibt sich:

$$\sigma_{kj} = 2\eta d_{kj} + \frac{2\sigma_Y}{\pi\sqrt{d_2}} \arctan\left(\frac{\sqrt{d_2}}{b}\right) d_{kj}. \quad 6-34$$

Um die Übersichtlichkeit zu erhöhen wurden folgende Abkürzungen eingeführt:

$$d_{kj} = \frac{\partial v_{(i}}{\partial x_{j)}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_k} \right), \quad 6-35$$

$$d_2 = \frac{1}{2} d_{kj} d_{jk}. \quad 6-36$$

Die Stetigkeit und das Aussehen des Arkustangens, führten zu Beginn der Arbeit zu dem Schluss, dass sich das Arkustangens-Modell für die Beschreibung von Bingham-Fluiden eignet. Das Experiment bestätigte diese Vermutung.

Das Bingham-Modell zeigt im Experiment einen großen Fehler und ist aufgrund der Unstetigkeit um den Nullpunkt für die Simulation ungeeignet.

Das Herschel-Bulkley-Modell zeigt im Experiment die besten Ergebnisse und lässt sich numerisch auf eine stabile und realitätsnahe Form bringen:

$$\sigma_{kj} = \frac{\eta \tilde{d}_2^n}{\sqrt{\tilde{d}_2}} d_{kj} + \frac{\sigma_Y}{\sqrt{\tilde{d}_2}} d_{kj}, \quad \tilde{d}_2 = d_2 h, \quad h = 1s^2 \quad 6-37$$

6.7 Bestimmung der Materialparameter

Mit Hilfe der Spannungsmodelle können jegliche Bingham-Fluide beschrieben werden, solange die zugehörigen Parameter zur Verfügung stehen. Jedes Modell besitzt seine eigenen Parameter und diese sind untereinander nur selten vertauschbar, deshalb finden sich in der Literatur eine Vielzahl unterschiedlich großer Kennwerte wieder. Den meisten Werten liegt ein Fit an die Messkurve von Spannungen über dem Schergeschwindigkeit zugrunde. Dabei werden die Konstanten solange variiert, bis sich die Spannungskurve an die Messkurve angepasst hat. Um für die Simulation die passenden Konstanten zu finden, müssen die mehrdimensionalen Spannungsmodelle zurück auf eine eindimensionale Form gebracht werden.

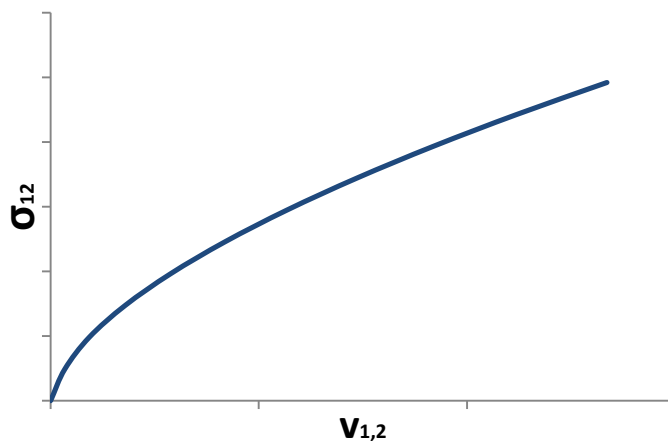


Abbildung 6.2: Skizze eindimensionaler Spannungsverlauf

Da alle Scherspannungen eine Abhängigkeit vom Geschwindigkeitsgradienten aufweisen, soll dieser Zusammenhang anschaulich beschrieben werden. In Abbildung 6.2 ist eine Kurve aufgeführt, wie sie auch in der Messung dargestellt wird. Zu einer beliebigen Spannung σ_{12} gehört ein Geschwindigkeitsgradient $v_{1,2}$, sodass gilt:

$$d_{kj} = \begin{bmatrix} 0 & v_{1,2} & 0 \\ v_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad 6-38$$

Eine weitere Größe, die in allen Spannungsmodellen verwendet wird, ist die 2. Invariante, welche bereits durch die Gleichung 6-36 beschrieben wurde. Für den eindimensionalen Fall ergibt sie sich aus dem Quadrat über den Geschwindigkeitsgradienten:

$$d_2 = (v_{1,2})^2. \quad 6-39$$

Aus den Gleichungen 6-38 und 6-39 lassen sich die Spannungsmodelle auf eindimensionale reduzieren. Beispielsweise ergibt sich für das Herschel-Bulkley-Modell die Gleichung 6-40 und schließlich 6-41.

$$\sigma_{kj} = \left(\eta v_{1,2}^{2n-1} + \frac{\sigma_Y}{v_{1,2}} \right) \begin{bmatrix} 0 & v_{1,2} & 0 \\ v_{1,2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad 6-40$$

$$\sigma_{12} = \eta v_{1,2}^{2n} + \sigma_Y \quad 6-41$$

Analog lassen sich Arkustangens und Bingham umformen zu den folgenden Gleichungen. Für das Arkustangens-Modell ergibt sich:

$$\sigma_{12} = 2\eta v_{1,2} + \frac{2\sigma_Y}{\pi} \arctan\left(\frac{v_{1,2}}{b}\right). \quad 6-42$$

Für das Bingham-Modell ergibt sich in 1D:

$$\sigma_{12} = 2\eta v_{1,2} + \sigma_Y. \quad 6-43$$

7 Ergebnisse und Diskussion

Häufig führt die Verwendung von verschiedenen Fitverfahren zu unterschiedlichen Kennwerten, für dieselbe Messkurve. Dies stellt die Simulation unter Umständen vor ein entscheidendes Problem, da sie das gesamte Spannungsmodell verwendet und nicht nur den, an die Messkurve gefitteten Abschnitt betrachtet. Wie groß der tatsächliche Einfluss dieser Fitvariationen ist, kann nur schwer eingeschätzt werden, denn zusätzlich wirkt sich ein weiterer Faktor negativ auf die Simulation aus. Dabei handelt es sich um die Kombination aus ein- und mehrdimensionalem Spannungsmodell. Es ist fraglich ob dasselbe Modell in verschiedenen Dimensionen allein durch Betrachten einer Komponente direkt miteinander vergleichbar ist.

Die Abbildung 7.1 zeigt die Abweichung zwischen Versuch und Fit sowie der 2-D-Simulation unter Verwendung des Herschel-Bulkley-Modells. Für den Vergleich mit der Simulation wurden sowohl Schergeschwindigkeit als auch -Spannungen herausgeschrieben. Alle drei Verläufe liegen sehr dicht bei einander. Dies lässt den Rückschluss zu, dass sich das Messergebnis mit Hilfe des Herschel-Bulkley-Modells sehr gut simulieren lässt.

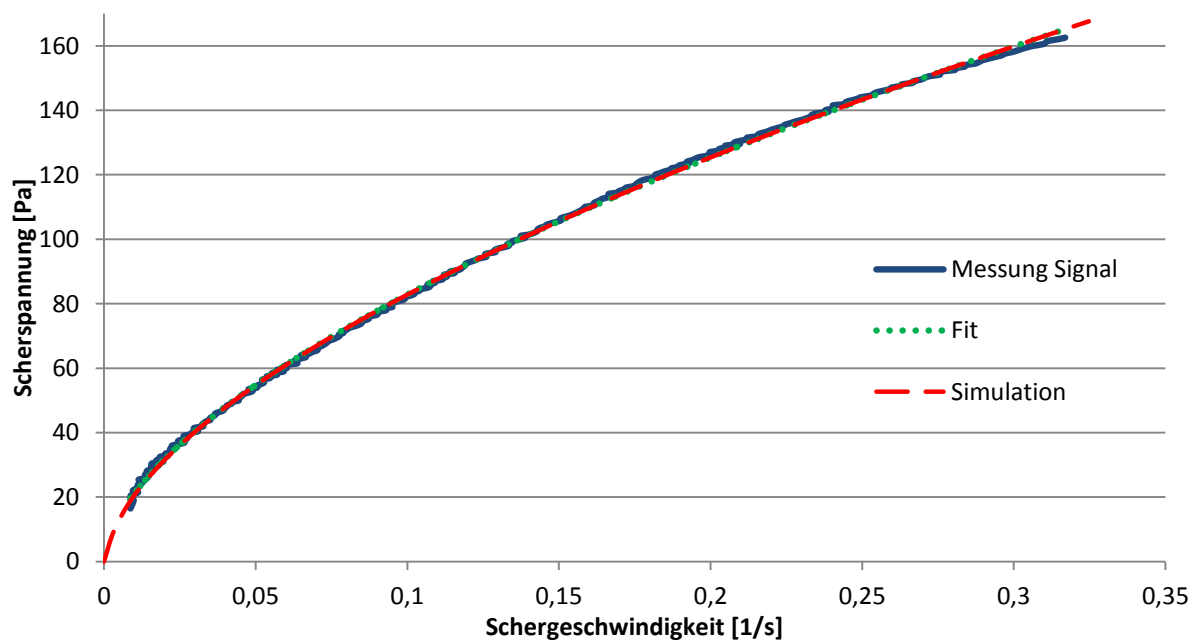


Abbildung 7.1: Herschel-Bulkley-Modell für „Signal“-Zahnpasta

Für die „Nivea“-Handcreme ergibt sich mit der Herschel-Bulkley-Modell ebenfalls ein sehr gute Übereinstimmung zwischen Messergebnis, Fit und Simulationsergebnis, siehe Abbildung 7.2. Das Simulationsergebnis stimmt fast perfekt mit dem Fit überein. Der Fit jedoch zeigt, dass das Herschel-Bulkley-Modell nicht optimal zur Beschreibung von Handcreme geeignet ist.

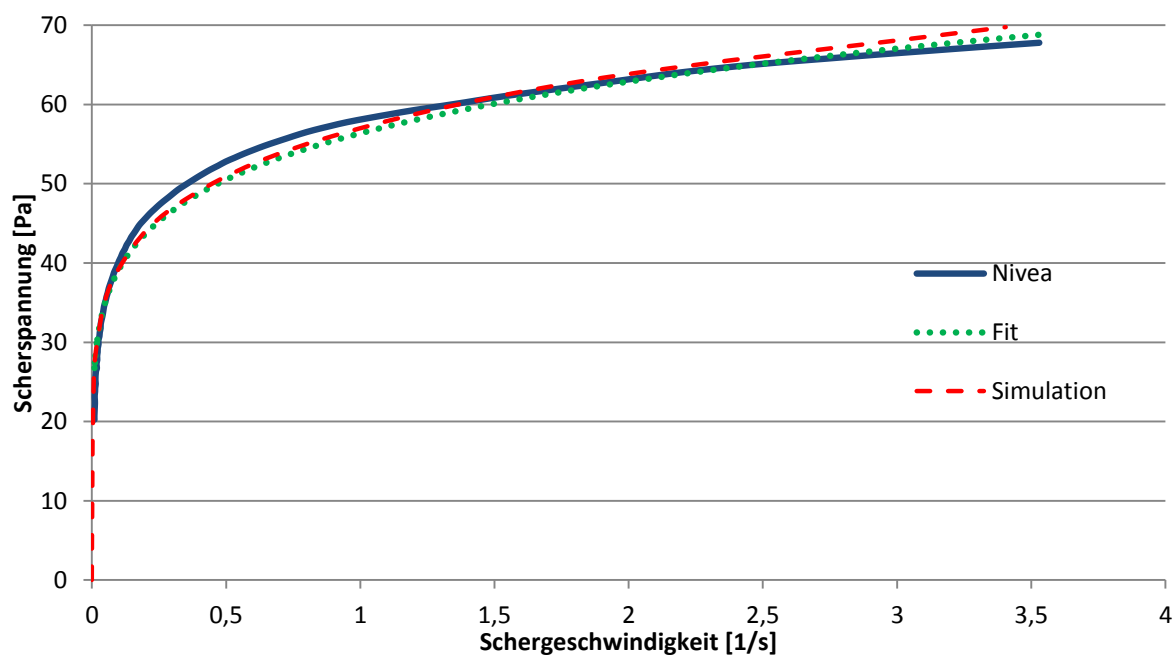


Abbildung 7.2: Herschel-Bulkley-Modell für „Nivea“-Handcreme

Für das Arkustangens-Modell ist zu beobachten, dass das Simulationsergebnis trotz gutem Fit nicht das Messergebnis widerspiegelt. Die nachfolgende Abbildung 7.3 zeigt den Unterschied zwischen Simulation und Fit auf.

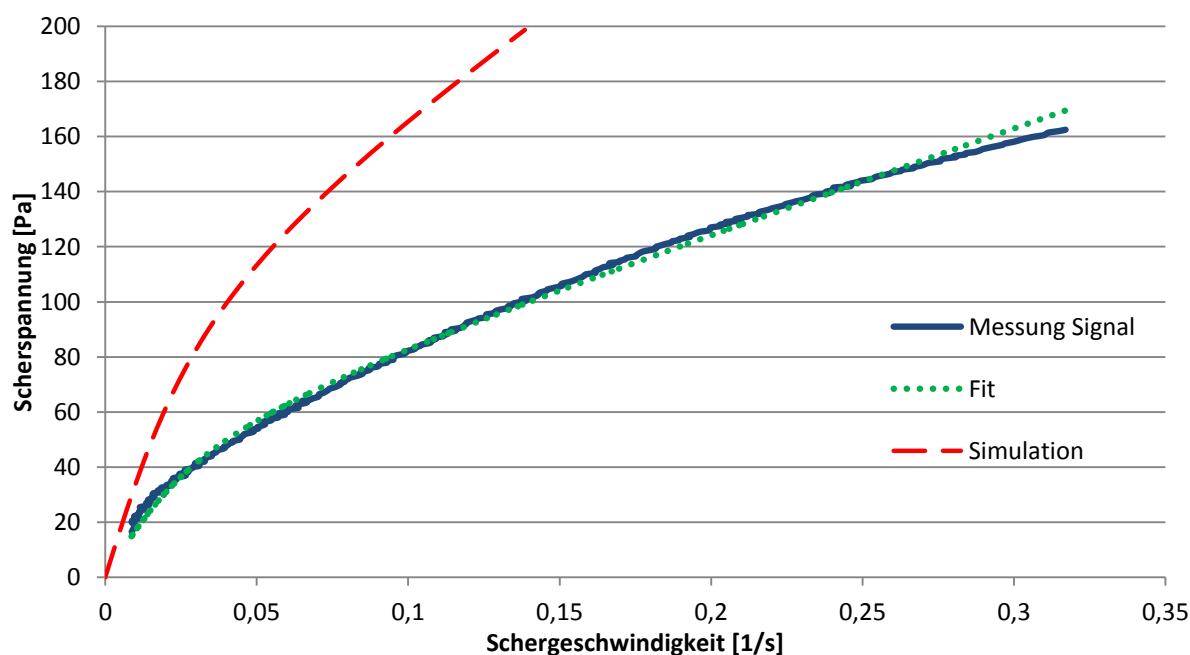


Abbildung 7.3: Arkustangens-Modell für „Signal“-Zahnpaste

Nach den nahezu übereinstimmenden Kurven des Herschel-Bulkley-Modells ist es offensichtlich, dass sich der Arkustangens nicht als Spannungsmodell in Verbindung einer Simulation eignet. Letztendlich gilt, dass unter den drei vorgestellten Modellen nur eines die erwarteten Resultate ergibt.

Der Hintergrund der Simulation bestand darin, Spannungsmodelle zu validieren, sodass anschließend das Verhalten eines Nicht-Newton'schen Fluids unter beliebiger Geometrie

vorhergesagt werden kann. In nachfolgenden Untersuchungen ließe sich beispielsweise eine Rohrströmung simulieren. Die vorhandenen Simulationsergebnisse könnten wiederum durch den Versuch validiert werden. Sollten diese Messergebnisse sich mit denen der Simulation decken, wäre das eine Bestätigung der vielseitigen Verwendbarkeit des Herschel-Bulkley Modells. Andererseits wären weitere Untersuchungen zur Bestimmung anderer bzw. neuer Spannungsmodelle wichtig, um im Falle einer Widerlegung einen entsprechenden Ersatz zu Verfügung zu haben.

8 Literaturverzeichnis

- [1] KEVAG, Koblenzer Elektrizitätswerk und Verkehr AG
http://www.kevag.de/online-service/energielexikon/?no_cache=1&like=F, vom 20.10.2011
- [2] <http://www.uni-protokolle.de/Lexikon/Fluid.html>, vom 20.10.2011
- [3] Universität Karlsruhe, Institut für Hydromechanik
<http://hydro.ifh.uni-karlsruhe.de/download/Kap01ps.pdf>, vom 07.11.2011
- [4] Universität Bayreuth, Physikalische Chemie, Modul KC, Versuch: Rheologie von kolloidalen Suspensionen
http://www.chemie.uni-bayreuth.de/pci/de/lehre/23489/kc_rheologie.pdf, vom 07.12.2011
- [5] Wolfram Demonstrations Project
http://demonstrations.wolfram.com/BinghamFluidFlowInACircularTube/HTMLImages/index.en/popup_2.jpg, vom 15.01.2012
- [6] Chemgagoo, FIZ CHEMIE Berlin
http://www.chemgapedia.de/vsengine/popup/vsc/de/glossar/b/bi/ingham_00045fluid.glos.html, vom 05.12.2011
- [7] Steffe, J. F., Rheological methods in food process engineering, Dept. of food science and human nutrition, Michigan State University, 1992
<http://www.egr.msu.edu/~steffe/Freebooks/Rheological%20Methods.pdf>, vom 25.11.2011
- [8] Ziegler, H., An introduction to thermomechanics, North-Holland Pub. Co., 1983
- [9] Direct Industry
http://img.directindustry.de/images_di/photo-g/kapillarviskosimeter-501312.jpg, vom 15.01.2012
- [10] Torsten Mattke
<http://rheologie.homepage.t-online.de/platplat.gif>, vom 18.01.2012
- [11] Torsten Mattke
<http://rheologie.homepage.t-online.de/kegplat.gif>, vom 18.01.2012
- [12] Torsten Mattke
<http://rheologie.homepage.t-online.de/mess.html>, vom 18.01.2012
- [13] Bürkle GmbH
http://www.buerkle.de/media/files/Downloads/Viskositäten_DE.pdf, vom 07.12.2011
- [14] TA Instruments, Rheology advantage - instrument control getting started guide, 2000
- [15] Suter-Kunststoffe AG
<http://www.swiss-composite.ch/pdf/i-Werkstoffdaten.pdf>, vom 09.12.2011

-
- [16] Bhavi Grou
<http://bhavigroup.com>, vom 16.01.2012
- [17] Doraiswamy, D., The origins of rheology: A short historical excursion, DuPont
iTechnologie, Experimental Station, Wilmington, 2002
http://www.rheology.org/sor/publications/Rheology_B/Jan02/Origin_of_Rheology.pdf
vom 28.02.2012
- [18] Chemgagroo, FIZ CHEMIE Berlin
http://www.chemgapedia.de/vsengine/popup/vsc/de/glossar/k/ke/kegel_00045platte_00045viskosimeter.glos.html, vom 05.12.2011
- [19] Chemgagroo, FIZ CHEMIE Berlin
<http://www.chemgapedia.de/vsengine/popup/vsc/de/glossar/r/rh/rheologie.glos.html>,
vom 05.12.2011