



Forschungszentrum Karlsruhe
in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 7029

Modellierung und Bewertung von Strömung und Transport in einem elektrisch erregten Mikromischer

I. Meisel

Institut für Kern- und Energietechnik
Programm Mikrosystemtechnik

September 2004

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7029

Modellierung und Bewertung von Strömung und
Transport in einem elektrisch erregten Mikromischer

I. Meisel

Institut für Kern- und Energietechnik
Programm Mikrosystemtechnik

Von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe (TH) genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2004

Impressum der Print-Ausgabe:

**Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

**Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft
Deutscher Forschungszentren (HGF)**

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-070294

Modellierung und Bewertung von Strömung und Transport in einem elektrisch erregten Mikromischer

Im vorliegenden Bericht werden neue Ergebnisse zur mathematischen Behandlung und numerischen Simulation von Flüssigkeits-Mikroströmungen vorgestellt und diskutiert. Die Erkenntnisse werden auf die Optimierung zweier ausgewählter Mikromischer-Geometrien angewandt. Zunächst wird der Satz der asymptotischen Randbedingungen abgeleitet, welche die numerische Berechnung der Mischerströmungen deutlich beschleunigen. Zur optimalen Vermischung geeignete Parameterkombinationen werden mittels eines niedrigdimensionalen Modells gefunden, welches die schnelle Berechnung zeitabhängiger, oszillierender Kanalströmungen erlaubt; auf diese Weise kann der Parameterraum in kurzer Zeit abgetastet werden. Es werden dann für die so gefundenen, optimalen Parameterkombinationen vollnumerische Simulationen zur elektrischen Erregung einer Wirbelstraße sowie zur elektrisch erregten Strömung in einem aufgefalteten Mäanderkanal durchgeführt, wobei nun die asymptotischen Randbedingungen Verwendung finden. Die quantitative Bewertung der Vermischungsgüte geschieht mit Hilfe mehrerer verschiedener Kriterien, welche auf der Verfolgung von Partikeln in der Strömung beruhen. Es zeigt sich, daß mit den hier untersuchten Geometrien eine sehr effiziente Vermischung möglich ist.

Modeling and evaluation of flow and transport in an electrically-excited micromixer

In the present report, new results regarding the mathematical treatment and the numerical simulation of liquid micro flows are discussed. The results are applied to optimize two micromixer geometries. At first, the set of asymptotic boundary conditions is derived which significantly accelerates the numerical computation of the mixing flows. Parameter combinations for optimal mixing are found by means of a low-dimensional model, allowing for fast computation of time-dependent, oscillating channel flows. That way, the parameter space can be scanned efficiently. Full numerical simulations of the electrical excitation of a vortex street and of the electrically-excited flow in a folded meander channel are conducted for the optimal parameter combinations, with the asymptotic boundary conditions in place. The quantitative evaluation of the mixing quality is realized by means of several distinct methods based on tracking particles in the flow. It turns out that for the investigated geometries, efficient mixing is achieved.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Mikrofluidik	1
1.2	Mischen bei kleinen Reynolds-Zahlen	2
2	Die Elektrische Doppelschicht	6
2.1	Elektrokinetische Effekte	6
2.2	Modelle für die elektrische Doppelschicht	7
2.3	Das Gouy-Chapman-Modell mit Debye-Hückel-Linearisierung	10
3	Asymptotische Behandlung der elektrischen Doppelschicht	13
3.1	Grundgleichungen	14
3.2	Entdimensionierung	15
3.3	Reskalierung	16
3.4	Innere Lösung	17
3.5	Asymptotische Anpassung	18
3.6	Verifikation	20
3.6.1	Exakte Lösung	20
3.6.2	Näherungslösung	21
4	Niedrigdimensionales Modell	25
4.1	Grundprinzip	25
4.2	Niedrigdimensionales Modell für oszillierende Kanalströmungen	26
5	Numerische Simulationen	33
5.1	Numerisches Verfahren	33
5.2	Verifikation	34
5.3	Erläuterung der Randbedingung	36
6	Vermischungsbewertung	39
6.1	Berechnung der Konzentrationsverteilung	39
6.2	Verfolgen der gesamten Grenzfläche	40
6.3	Verfolgen eines Teils der Grenzfläche	43
6.4	Bestimmung des Konzentrationsfeldes mittels Partikelverfolgung	43
7	Ergebnisse	53
7.1	Untersuchte Mischergeometrien	53
7.2	Mischkanal mit internem Hindernis	55
7.2.1	Einfluß der Anregungsfrequenz	55
7.2.2	Einfluß der Anregungsamplitude	58

7.3	Aufgefalteter Mäander-Mischkanal	61
8	Zusammenfassung und Ausblick	68
A	Lösung der linearisierten Poisson-Boltzmann-Gleichung	71
	Literaturverzeichnis	72

Liste der verwendeten Symbole

Lateinische Buchstaben

\hat{A}	Amplitude
\hat{B}	Amplitude
C	Integrationskonstante
C_1	Integrationskonstante
C_2	Integrationskonstante
C_3	Integrationskonstante
D	Stoffdiffusivität; Anzahl der Bilanzzellen am Mischerauslaß; Hindernis-Durchmesser
E	extern angelegtes elektrisches Feld
E_x	Komponente des extern angelegten elektrischen Feldes in x -Richtung
E_y	Komponente des extern angelegten elektrischen Feldes in y -Richtung
E_0	selbstinduziertes elektrisches Feld (dimensionsbehaftet)
E_{x0}	Komponente des selbstinduzierten elektrischen Feldes in x -Richtung
E_{y0}	Komponente des selbstinduzierten elektrischen Feldes in y -Richtung
F	Anregungsfrequenz (dimensionslos)
F_{el}	elektrische Kraft
F_p	Druckkraft
F_{Π_x}	elektrische Kraft in x -Richtung
F_{Π_y}	elektrische Kraft in y -Richtung
H	Höhe des Mischerauslasses
L	Kanallänge
L	Differentialgleichungsoperator
N	Anzahl der Ansatzfunktionen; Frequenz (dimensionslos)
P	Druck (dimensionslos)
P_0	Druck am Kanaleinlaß (dimensionslos)
Q	Kriterium zur Bewertung der Vermischungsgüte
R	Residuum
\hat{R}	Autokorrelationsfunktion
Re	Reynolds-Zahl, gebildet mit d_0
Re_D	Reynolds-Zahl, gebildet mit D
Sc	Schmidt-Zahl
St	Strouhal-Zahl
T	Zeit (dimensionslos); absolute Temperatur; Chebyshev-Polynom erster Art
T_{per}	Periodendauer
T_0	Anregungsperiode
U	Geschwindigkeitskomponente in x -Richtung (dimensionslos)
\mathbf{U}	Geschwindigkeitsvektor
V	Geschwindigkeitskomponente in y -Richtung (dimensionslos)
X	Koordinatenrichtung (dimensionslos)
Y	Koordinatenrichtung (dimensionslos)

a	Reihenkoeffizient; Integrationsgrenze
b	Integrationsgrenze
c	Konzentration
d_0	charakteristische Länge/Kanalweite
e	Elementarladung
f_c	Nyquist-Grenzfrequenz
f	Frequenz; Anregungsfrequenz
k	Boltzmann-Konstante; Wellenzahl
l_0	anfängliche Grenzflächenlänge
l_{an}	Grenzflächenlänge bei angeschaltetem elektrischen Feld
l_{aus}	Grenzflächenlänge bei ausgeschaltetem elektrischen Feld
l_D	Debye-Länge
l_0	Grenzflächenlänge zum Zeitpunkt T
l^*	typische Abmessung einer Rechenzelle
n	Ionendichte
n_i	Dichte der Ionensorte i
n_{\oplus}	Dichte der positiv geladenen Ionen
n_{\ominus}	Dichte der negativ geladenen Ionen
n_b	Anzahl blauer Partikel
n_r	Anzahl roter Partikel
p	Druck (dimensionsbehaftet); Reihenkoeffizient
q	Reihenkoeffizient
q_W	Wandladungsdichte
s	Standardabweichung
t	Zeit (dimensionsbehaftet)
u	Geschwindigkeitskomponente in x -Richtung (dimensionsbehaftet)
\mathbf{u}_a	Näherung für gesuchte Größe \mathbf{u}
\mathbf{u}	Geschwindigkeitsvektor
\hat{u}	Geschwindigkeitsamplitude (dimensionsbehaftet)
\bar{u}	Geschwindigkeitskomponente in wandtangentialer Richtung (dimensionsbehaftet)
u_0	mittlere Strömungsgeschwindigkeit
u^*	typische Geschwindigkeit in einer Rechenzelle
v	Geschwindigkeitskomponente in y -Richtung (dimensionsbehaftet)
\bar{v}	Geschwindigkeitskomponente in wandnormaler Richtung (dimensionsbehaftet)
x	Koordinatenrichtung (dimensionsbehaftet); Wert in einer diskreten Wertefolge
\bar{x}	wandtangentiale Koordinatenrichtung (dimensionsbehaftet)
\mathbf{x}_0	fester Ort
y	Koordinatenrichtung (dimensionsbehaftet)
\bar{y}	wandnormale Koordinatenrichtung (dimensionsbehaftet)
z_i	Valenz der Ionensorte i

Griechische Buchstaben

Δt Zeitschrittweite

Δy	Höhe einer Bilanzzelle
Δt_B	Bilanzzeitraum
Π_0	Kennzahl (dimensionslos)
Π_x	Kennzahl (dimensionslos)
Π_y	Kennzahl (dimensionslos)
Ω	Anregungsfrequenz (dimensionslos)
δ	Position der Stern-Ebene; kleiner Parameter (dimensionslos)
ε_0	Dielektrizitätskonstante (Vakuum)
ε_r	relative Dielektrizitätskonstante
ϕ	Ansatzfunktion
κ	Debye-Hückel-Parameter
μ	dynamische Viskosität einer Flüssigkeit
μ_i	elektrochemisches Potential der Ionensorte i
ν	kinematische Viskosität einer Flüssigkeit
ω	Gewichtungsfunktion; Anregungsfrequenz (dimensionsbehaftet)
ω_0	Anregungsfrequenz (dimensionsbehaftet)
ψ	elektrisches Potential; Ansatzfunktion
ψ_W	elektrisches Wandpotential
ψ_δ	elektrisches Potential in der Stern-Ebene
ρ	Flüssigkeitsdichte
ρ_e	elektrische Netto-Ladungsdichte
ζ	Zeta-Potential

Andere

\Im	Imaginärteil
\Re	Realteil

Indizes

\square_B	Wert im Bulk
\square_{GS}	Gram-Schmidt-orthogonalisiert
\square_K	Kunststoff
\square_W	Wert auf der Wand, Wert innerhalb der EDL (Wandlösung)
\square_{WL}	wäßrige Lösung
\square_{aus}	Wert am Auslaß
\square_{ein}	Wert am Einlaß
\square_{id}	ideal
\square_{ijmk}	indizierte Größen
\square_{max}	Maximalwert
\square_n	Vektorkomponente normal zur Wand
\square_t	Vektorkomponente tangential zur Wand, partielle Ableitung nach der Zeit t
\square_{wc}	schlechtestmöglich („worst case“)

- \square_x partielle Ableitung nach der Ortskoordinate x
- \square_y partielle Ableitung nach der Ortskoordinate y
- \square_∞ Wert weit weg von der Wand
- $\dot{\square}$ partielle Ableitung nach der Zeit

Kapitel 1

Einleitung

In diesem Kapitel soll ein kurzer Überblick über die Mikrofluidik im Allgemeinen gegeben werden. Im Anschluß daran wird gesondert auf das hier relevante Teilgebiet eingegangen, das Mischen in mikrofluidischen Strömungsanlagen; es wird ein Überblick über den Stand der Technik gegeben, und die Motivation für die gestellte Aufgabe wird erläutert.

1.1 Mikrofluidik

Der Begriff Mikrofluidik bezieht sich auf Strömungen mit typischen Längenskalen unter einem Millimeter. Mit dem Aufkommen moderner Mikrofertigungstechnologien wie beispielsweise der Lithographie aus der Halbleiterindustrie oder der Mikrofertigung (herkömmliche Bearbeitungsmethoden wie Drehen, Fräsen, Bohren, spezialisiert auf kleine Dimensionen), sowie z.B. Ätzverfahren wurde es Anfang der neunziger Jahre möglich, Bauteile mit Abmessungen im Mikrometerbereich mit hoher Präzision zu fertigen. Der Begriff „Miniaturized total chemical analysis systems“ (μ TAS) wurde erstmals in der chemischen Prozeßindustrie geprägt [31], wo zuerst ein Bedarf an Anlagen bestand, welche deutlich kleiner ausfielen als die herkömmlichen Gerätschaften; später wurden die besonderen Vorteile auch in der chemischen und biomedizinischen Analytik sowie der Lebensmittelindustrie wahrgenommen. Der Gewinn in der Verwendung solcher miniaturisierter Apparaturen liegt unter anderem im geringeren Verbrauch oftmals teurer und knapp bemessener Chemikalien zur Analyse oder Weiterverarbeitung. Chemische Reaktionen laufen wesentlich schneller ab als in makroskopischen Anlagen, was die Prozeßzeiten drastisch herabsetzt, und die thermische Prozeßkontrolle wird durch das große Verhältnis von Oberfläche zu Volumen deutlich erleichtert. Aufgrund der kleinen Abmessungen lassen sich alle notwendigen Prozeßschritte auf kleinem Raum integrieren; hier entstand der Begriff des „Lab-on-a-chip“ (LOC). Mit diesen Technologien ist es möglich, kleinste Stoffmengen, insbesondere Flüssigkeiten im Nano- bis Picoliterbereich, zu analysieren und zu verarbeiten. Weiterhin wird die zeitgleiche, parallele Durchführung von Prozeßschritten gangbar, was z.B. in der Genomanalyse, wo derselbe Vorgang viele Male mit variierten Reaktanden bewerkstelligt werden muß, eine große Zeitersparnis bedeutet; dasselbe gilt für DNA- oder Medikamentenanalysen oder kombinatorische Synthesen. Weitere Anwendungsfelder, welche von der Mikrosystemtechnologie profitieren, sind zahlreiche Arbeitsschritte aus der Biotechnologie wie z.B. die Behandlung einzelner Zellen mit Testsubstanzen; hier kann es z.B. von entscheidender Bedeutung sein, daß die Positionierung der Zelle im Raum und die Applikation von Substanzen auch mit subzellulärer Genauigkeit (beispielsweise die Anströmung nur einer Hälfte der Zelle mit einer Nährlösung) vorgenommen werden kann. Das Sortieren von Zellen, Polymeren oder von in einer Trägerflüssigkeit dispergierten Par-

tikeln wird auch deutlich erleichtert, ebenso wie andere Standardverfahren wie die Kapillarelektrophorese oder die Erstellung von Immunoassays. Ein weiterer Vorteil von μ TAS ist die gute Handhabbarkeit und Mobilität der Gerätschaften aufgrund der kleinen Abmessungen. So wird es z.B. möglich, schädliche Substanzen erst am Ort des Gebrauchs in nicht mehr als der erforderlichen Menge herzustellen, was Transport und Lagerung erheblich erleichtert. Es können bei Bedarf Analysen verschiedenster Stoffe direkt vor Ort vorgenommen werden, und der Ablauf von stark exothermen Reaktionen (Explosionsgefahr) wird durch die sehr kleinen Stoffmengen, welche nun für die vorgesehenen Arbeitsgänge ausreichend sind, deutlich entschärft. Die meisten der genannten Verfahren sowie viele weitere beinhalten die Handhabung und die Verarbeitung von Flüssigkeiten; hier kommt die Mikrofluidik zum Einsatz. Die Flüssigkeiten müssen in oftmals komplexen Strömungskanalverschaltungen transportiert, getrennt, vermischt, umgeleitet, analysiert, mit Feststoffpartikeln angereichert oder zu chemischen Reaktionen angeregt werden. Dazu benötigt man elementare Bauelemente wie Ventile, Pumpen, Mischer, Sensoren, Schalter, Dispergierer, Filter, Reaktionskammern und Heizelemente. Diese Grundbausteine werden dann zu komplexen Gesamtsystemen verschaltet und können so vielfältige Aufgaben übernehmen. Bei der Auslegung mikrofluidischer Anlagen muß im Rahmen von Simulationsrechnungen auch auf theoretische Modelle zurückgegriffen werden. Trotz der kleinen Längenskalen ist für Flüssigkeiten immer noch der herkömmliche Kontinuumsmechanische Ansatz gültig; allerdings gewinnen Oberflächeneffekte und rein geometrische Eigenschaften der Strömungsstrukturen (Kanalformen, Querschnitts-Aspektverhältnis) im Gegensatz zu makroskopischen Anlagen wegen des wesentlich größeren Verhältnisses von Oberfläche zu Volumen stark an Bedeutung. Trägheitseffekte hingegen spielen eine untergeordnete Rolle, was an der kleinen Reynolds-Zahl deutlich wird; diese liegt meist in der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$. Auf mikrofluidische Strömungen kann auf vielfältige Weise Einfluß genommen werden, so z.B. mittels von außen eingebrachter Kraftfelder; hierzu zählen etwa angelegte Druckgradienten, elektrische und magnetische Felder, akustische Einflüsse oder Kapillarkräfte. Ein weiteres Beispiel zur Beeinflussung ist die kontrollierte zyklische Deformation von Kanalwänden, was zum peristaltischen Pumpen genutzt werden kann. Etablierte Verfahren wie das elektroosmotische Pumpen beruhen ebenfalls auf einem typischen mikrofluidischen Phänomen, der sog. elektrischen Doppelschicht; hierauf wird in Kapitel 2 gesondert eingegangen werden.

1.2 Mischen bei kleinen Reynolds-Zahlen

Ein wichtiges Grundelement vieler mikrofluidischer Aufgabenstellungen ist das Vermischen von Flüssigkeiten. Allgemein besteht dieser Vorgang aus zwei Teilprozessen, nämlich (i) der Vergrößerung der virtuellen Grenzfläche¹ zwischen den Flüssig-

¹Strenggenommen existiert zwischen mischbaren Flüssigkeiten keine Grenzfläche. Dennoch wird in der gesamten Arbeit von einer „(virtuellen) Grenzfläche“ gesprochen werden, wenn der Grenzbereich gemeint ist, in welchem die Flüssigkeiten einander kontaktieren und durch molekulare Stoffdiffusion miteinander vermischt werden.

keiten und (ii) dem Abschluß des Mischvorgangs durch Stoffdiffusion auf molekularer Längenskala. Die Vergrößerung der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten begünstigt die Stoffdiffusion, da nun größere Anteile der beiden Flüssigkeiten ineinander diffundieren können. In herkömmlichen, makroskopischen Anlagen wird diese Vergrößerung meist durch Verrühren mit Hilfe gewollter Strömungsturbulenz oder Rühranlagen bewerkstelligt, da hier die Reynolds-Zahlen ausreichend groß sind die geometrischen Abmessungen genügend Raum für bewegte mechanische Teile lassen. In Mikromischern hingegen sind die Reynolds-Zahlen aufgrund der geringen Abmessungen üblicherweise so klein, daß Turbulenz nicht auftritt und Rührwerkzeuge nicht oder nur in Einzelfällen mit extrem großem Aufwand realisiert werden können. Die Problematik bei Mikromischern besteht also darin, den Teilschritt (i), die Vergrößerung der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten, zu bewerkstelligen. Hierzu sind in der Literatur mehrere Ansätze zu finden; diese lassen sich in zwei Kategorien einteilen. (i) Passive Mikromischer zeichnen sich meist durch stationäre Durchströmung sowie eher komplizierte Geometrien aus, während (ii) aktive Mikromischer zumeist zeitabhängig arbeiten und in relativ einfachen, oftmals ebenen Geometrien realisiert werden können; der Mischvorgang wird durch das Einbringen von zusätzlicher Energie von außen gefördert. Durch die auftretenden, zusätzlichen Parameter (Amplituden, Frequenzen oder ähnliches) kommen zusätzliche Freiheitsgrade hinzu, welche genutzt werden, um den Mikromischer auf die jeweilige Anwendungssituation abzustimmen und so das Mischergebnis individuell zu optimieren. Das populärste passive Prinzip ist die Multilamination [46]. Durch mehrfaches Aufspalten und Wiedervereinigen von Teilströmen der aneinandergrenzenden Flüssigkeiten wird eine schnelle Vergrößerung der Grenzfläche sowie eine Reduzierung der Dicke einzelner Flüssigkeitslamellen erreicht. Die Realisierung dieses Prinzips in einer Mischergeometrie bedingt jedoch immer eine komplizierte, dreidimensionale Strömungsführung, was eine entsprechend aufwendige Fertigung des Mixers impliziert und deshalb nicht ohne weiteres für die billige Massenfertigung geeignet ist. Ein weiteres Mischerkonzept beruht auf Zentrifugalkräften, die in Kanalkrümmern auftreten [55]. Jenseits einer kritischen Strömungsgeschwindigkeit bilden sich sog. Dean-Wirbel aus, welche als Sekundärströmung im Kanalquerschnitt die Flüssigkeiten miteinander verrühren. Auch chaotische Advektion kann zur Vermischung genutzt werden. In [50] wird eine Kanalwand geeignet mit Riefen strukturiert, um eine chaotische Sekundärströmung zu erzeugen; [29] und [6] verwenden einen helixförmigen Kanal, um ebenfalls chaotische Strömungsformen zu erzeugen. Mit Hilfe von mechanischen Ultraschallwellen können Störungen in die Strömung eingebracht werden, welche den Mischvorgang fördern [54]. [35] verwendet zeitlich veränderliche Seitenkanalströmungen, mit deren Hilfe die Strömung im Hauptkanal periodisch gestört wird und so eine komplexe Mischerströmung hervorruft. In Abhängigkeit von den Geschwindigkeitsamplituden in den Seitenkanälen und der Phasenverschiebung der Seitenkanalströmungen zueinander kann auch mit diesem Prinzip eine chaotische Systemantwort erreicht werden. [36] regt mit einem externen elektrischen Feld eine bislang noch nicht erklärte Instabilität an, welche die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten längt und auffaltet. [42] versieht die Kanalwände mit einer wechselnden Verteilung des Zeta-Potentials, wodurch zelluläre Strömungen entstehen, wenn von außen ein elektrisches Feld angelegt wird; bei zeitlich veränderlichem Zeta-Potential auf den Kanalwänden kann

es zu chaotischer Advektion kommen, was die Vermischung weiter begünstigt. [30] ordnet am Boden einer Mischkammer Gruppen von Rotoren an, welche aus einem magnetisierbaren Material mikrofertigt sind. Diese werden durch ein rotierendes Magnetfeld in Bewegung versetzt und wirken so als mechanische Rührer. Weiterhin können Magnetfelder im Zusammenspiel mit elektrischen Feldern in Elektrolyten Lorenz-Kräfte induzieren, mit welchen die Mischerströmung beeinflusst werden kann [5, 43, 56].

Das in der vorliegenden Arbeit zur Anwendung kommende Prinzip zur Förderung der Vermischung zweier Flüssigkeiten beruht auf der Wirkung von außen angelegter elektrischer Felder auf die Flüssigkeiten in der Nähe der Kanalwände, wo das Strömungsmedium elektrisch nicht neutral ist; dieser für Flüssigkeits-Mikroströmungen typische Effekt wird in Kapitel 2 näher erläutert. Es wird von einem generischen Mischermodell nach Abbildung 1.1 ausgegangen. Die beiden zu mischenden Flüssigkeiten werden, aus zwei getrennten Zuführungskanälen kommend, in einen gemeinsamen Mischkanal geleitet, wo die eigentliche Vermischung stattfindet. In diesem Mischkanal soll mit Hilfe externer elektrischer Kräfte die Vermengung der Flüssigkeiten realisiert werden („elektrisches Rühren“), so daß die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten möglichst stark gelängt und aufgefaltet wird und die molekulare Stoffdiffusion den Mischvorgang effizient abschließen kann. Welche Maßnahmen zur Lösung dieser Aufgabe zu treffen sind, soll in der vorliegenden Arbeit geklärt werden.

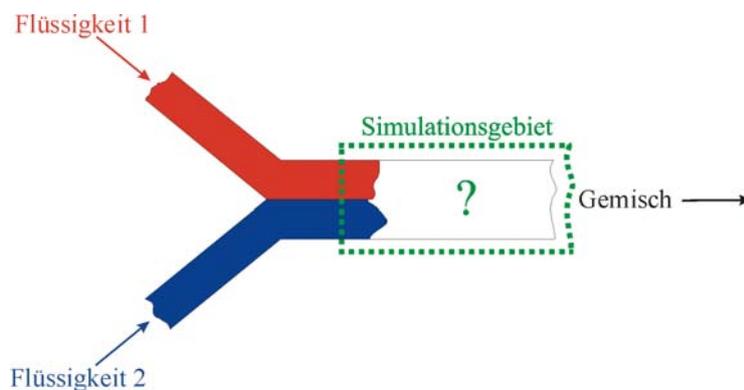


Abbildung 1.1: Generisches Mischermodell.

In Kapitel 2 soll die Physik der elektrischen Doppelschicht eingeführt werden. Im Anschluß daran erläutert Kapitel 3 die Ergebnisse der asymptotischen Näherungen, die hier zur Verwendung kommen. Diese Näherungen führen zu einer deutlich vereinfachten numerischen Behandlung der Mikromischerströmungen. Danach soll das niedrigdimensionale Modell vorgestellt werden, mit dessen Hilfe queroszillierende Kanalinnenströmungen berechnet werden, um ein Kriterium zur Vermischungsgüte abzuleiten. Kapitel 5 erläutert das bei der Simulation der Mischerströmungen zur Anwendung kommende numerische Verfahren, die zugehörige Verifikation und veranschaulicht die Verwendung des in Kapitel 3 abgeleiteten asymptotischen Modells. In Kapitel 6 werden verschiedene Ansätze zur Vermischungsbewertung diskutiert und miteinander verglichen, und es wird ein Kriterium zur Bewertung der

Vermischungsgüte abgeleitet. Die Ergebnisse zur Vermischung in mikrofluidischen Strömungsanlagen mit Hilfe elektrischer Kräfte werden in Kapitel 7 vorgestellt, und es werden Schlußfolgerungen gezogen, wie eine möglichst optimale Vermischung erreicht werden kann. Kapitel 8 faßt die Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf mögliche Verbesserungen und Erweiterungen der erzielten Ergebnisse und der verwendeten Methoden.

Kapitel 2

Die Elektrische Doppelschicht

Werden zwei unterschiedliche Phasen, z.B. ein fester Stoff und eine Flüssigkeit, in Kontakt miteinander gebracht, so wird sich an ihrer gemeinsamen Kontaktfläche eine Ladungstrennung ausbilden. Wenn auf einer Seite der Phasengrenzfläche ein Überschuß an positiver Ladung vorhanden ist, wird sich auf der anderen Seite ein Überschuß an negativer Ladung ausbilden. Diese Anordnung von Ladungen an einer Phasengrenze wird als Elektrische Doppelschicht (engl. Electrical Double Layer, EDL) bezeichnet. Dieses Phänomen ist in vielen Bereichen der Technik von Bedeutung, so z.B. in der Elektrokinetik, bei der Elektrokatalyse, bei Korrosion, Adsorption und Kristallwachstum, für die Stabilität von Kolloiden, in Strömungen von Kolloid-Suspensionen oder Strömungen von Elektrolyten durch poröse Medien. Insbesondere in elektrokinetischen Anwendungen wie der Elektroosmose und der Elektrophorese wird dieser Effekt gezielt ausgenutzt (elektroosmotisches Pumpen, elektrophoretische Trennung).

Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über elektrokinetische Phänomene gegeben werden. Im Anschluß daran werden mehrere Modellansätze für die EDL vorgestellt, wie sie in der Literatur zu finden sind. Abschließend wird das Modell vorgestellt, welches in der vorliegenden Arbeit für die Simulationsrechnungen verwendet wird.

2.1 Elektrokinetische Effekte

Wenn ein Elektrolyt und eine geladene Festkörper-Oberfläche in Kontakt miteinander stehen, bildet sich in der Regel eine EDL aus. Wechselwirkt diese EDL mit einem elektrischen Feld, und befindet sich die eine Phase in Bewegung relativ zu der anderen Phase oder wird in Bewegung versetzt, beobachtet man vier verschiedene Phänomene, die unter dem Begriff Elektrokinetik zusammengefaßt werden.

Elektrophorese Bewegung einer geladenen Oberfläche relativ zu einer Flüssigkeit aufgrund eines angelegten elektrischen Feldes, z.B. die Wanderung von geladenen Partikeln (Ionen oder Makromoleküle mit umgebender EDL) in einem Elektrophorese-Gel.

Elektroosmose Bewegung einer Flüssigkeit relativ zu einer stationären Oberfläche aufgrund eines angelegten elektrischen Feldes, z.B. elektroosmotisches Pumpen eines Elektrolyten durch eine Kapillare.

Streaming Potential Wenn ein Elektrolyt entlang einer Grenzfläche strömt, baut sich ein elektrisches Feld auf, das durch den Transport der in der Flüssigkeit befindlichen Ladungsträger in Fließrichtung hervorgerufen wird. Ein Beispiel ist das hydrodynamische Pumpen eines Elektrolyten durch einen Mikrokanal, wobei sich ein elektrisches Feld entgegen der Fließrichtung aufbaut. Hier sind

im Vergleich zur Elektroosmose Ursache (Strömung) und Wirkung (elektrisches Feld) vertauscht.

Sedimentation Potential Bewegung einer geladenen Oberfläche relativ zu einer Flüssigkeit, z.B. das schwerkraftbedingte Absetzen von geladenen Partikeln (Sedimentation) in einer Flüssigkeit. Hier sind im Vergleich zur Elektrophorese Ursache (Partikelbewegung) und Wirkung (elektrisches Feld) vertauscht.

2.2 Modelle für die elektrische Doppelschicht

Die meisten Festkörper-Oberflächen bilden eine elektrische Oberflächenladung aus, wenn sie mit einer elektrolytischen Flüssigkeit in Kontakt gebracht werden [25, 26]. In mikrofluidischen Anwendungen bestehen diese Oberflächen (z.B. Wände von Strömungskanälen) häufig aus Glas oder Kunststoff, und als Elektrolyten kommen häufig wäßrige Lösungen zum Einsatz. Mechanismen, die zur Aufladung der Oberfläche führen, sind z.B. die Ionisierung oder Dissoziation von Oberflächengruppen ($\text{SiOH} \rightleftharpoons \text{SiO}^- + \text{H}^+$ oder $\text{COOH} \rightleftharpoons \text{COO}^- + \text{H}^+$), was zu einer negativen Aufladung der Oberfläche führt, oder die Anbindung (Adsorption) von Ionen an eine zuvor ungeladene Oberfläche. Die Aufladung der Oberfläche wird durch Ladung entgegengesetzten Vorzeichens in der Flüssigkeit kompensiert, so daß das Gesamtsystem elektrisch neutral ist. Das Zusammenspiel der beiden Bereiche unterschiedlicher Ladung bezeichnet man als Elektrische Doppelschicht, siehe auch Kapitel 2.1.

Es finden sich in der Literatur verschiedene Modelle, die die Verhältnisse in der Nähe einer solchen Fest-Flüssig-Phasengrenze beschreiben. Das einfachste Modell ist das Helmholtz-Modell [22], welches die EDL als einfachen Plattenkondensator auffaßt, siehe Abbildung 2.1. Dabei wird angenommen, daß sich solvatisierte (von Lösungsmittel-Molekülen, meist Wasser, umschlossene) Ionen entgegengesetzter Ladung (Gegenionen) direkt auf der Oberfläche des Festkörpers anlagern und die Oberflächenladung kompensieren. Die Festkörper-Oberfläche und die angrenzende Schicht aus Gegenionen entsprechen den beiden Kondensatorplatten. Diffusion wird in diesem Modell nicht berücksichtigt, da alle auf der Flüssigkeitsseite an der EDL-Bildung beteiligten Ionen als fix mit dem Festkörper verbunden angenommen werden. Das Potential in der EDL fällt linear, wie bei einem Plattenkondensator, vom Wert ψ_W auf der Wand auf den Wert Null in der sog. inneren Helmholtz-Ebene (engl. Inner Helmholtz Plane, IHP) ab. Die IHP geht durch den Mittelpunkt der Gegenionen, die sich auf der Oberfläche angelagert haben. Mit diesem Ansatz kann die Abhängigkeit der Kapazität des Kondensatormodells von der Wandladung und der Ladungsträger-Konzentration in der Flüssigkeit nicht erklärt werden.

Gouy [19] und Chapman [10] hingegen nehmen unabhängig voneinander an, daß die Gegenionen und die Ionen gleicher Ladung (Koionen) in der Flüssigkeit nicht an die Festkörper-Oberfläche gebunden sind, siehe Abbildung 2.2. Vielmehr ordnen sie sich in einer diffusen Schicht angrenzend an die Oberfläche so an, daß sich ein Gleichgewicht aus elektrostatischen Kräften und dem vergleichmäßigen Einfluß der Stoffdiffusion einstellt. Die EDL besteht hier aus der sog. kompakten Schicht der Wandladungen einerseits und der diffusen Atmosphäre der Gegen- und Koio-

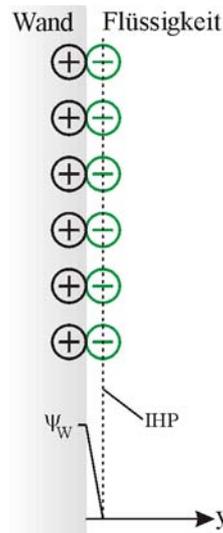


Abbildung 2.1: Helmholtz-Modell.

nen in der Flüssigkeit andererseits. Um die Oberflächenladung des Festkörpers zu kompensieren, sammeln sich Gegenionen vermehrt in der Nähe der Oberfläche an (elektrostatische Anziehung), während derselbe Bereich an Koionen verarmt (elektrostatische Abstoßung). Weit weg von der Oberfläche hat die Wandladung keinen Einfluß auf die Konzentrationsverteilung der Gegen- und Koionen; hier dominieren die Kräfte der Stoffdiffusion, so daß positiv und negativ geladene Ionen dort in gleicher Konzentration n_∞ homogen verteilt vorliegen. Es ergibt sich ein exponentieller Verlauf des Potentials in der EDL, welcher vom Wert auf der Oberfläche ψ_W auf den Wert Null weit weg von der Oberfläche abfällt. Zur Verdeutlichung sind in Abbildung 2.2 auch die Konzentrationsverläufe der Gegen- und Koionen n_\ominus und n_\oplus schematisch gezeigt. Da die Ionen in diesem Modell als Punktladungen angenommen werden, wird ihr endlicher Radius nicht berücksichtigt, und das Modell liefert nahe der Festkörper-Oberfläche zu hohe Ionenkonzentrationen. Außerdem wird vorausgesetzt, daß die Flüssigkeit als homogenes Medium mit überall gleicher Dielektrizitätskonstante angenommen werden kann. Die Dicke der diffusen Schicht wird durch die sog. Debye-Länge l_D charakterisiert; diese wird in Kapitel 2.3 näher erläutert.

Stern [49] verfeinert die Modellierung der EDL weiter, indem er den endlichen Ionenradius berücksichtigt (Verdrängung von Nachbarmolekülen, sterische Effekte) und weiterhin erkennt, daß sich die Dielektrizitätskonstante der Flüssigkeit in Abhängigkeit von der lokalen Feldstärke ändern kann. Beide Effekte machen sich nahe der Festkörper-Oberfläche und bei höheren Wandpotentialen bemerkbar. Das Stern-Modell besteht aus einer Schicht an der Wand haftender, nicht solvatisierter (nicht von Lösungsmittel-Molekülen umschlossener) Gegenionen, die jedoch nicht die gesamte Oberflächenladung kompensieren, siehe Abbildung 2.3. Die Ebene, die im Abstand δ durch die Mittelpunkte dieser Gegenionen verläuft, heißt Stern-Ebene. Wie beim Helmholtz-Modell verläuft das Potential zwischen der Festkörper-Oberfläche und der Stern-Ebene linear; es fällt vom Wert ψ_W an der Wand auf den Wert ψ_δ in

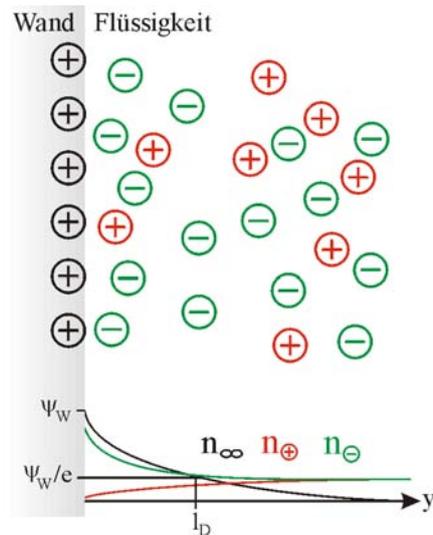


Abbildung 2.2: Gouy-Chapman-Modell.

der Stern-Ebene ab. Den Rand der Schicht im Abstand 2δ von der Oberfläche bezeichnet man als Scherebene; das Potential in dieser Ebene wird als Zeta-Potential ζ bezeichnet. An die Stern-Ebene grenzt der diffuse Teil der EDL an; hier fällt das Potential wie auch beim Gouy-Chapman-Modell vom Wert ψ_δ exponentiell auf den Wert Null weit weg von der Festkörper-Oberfläche ab.

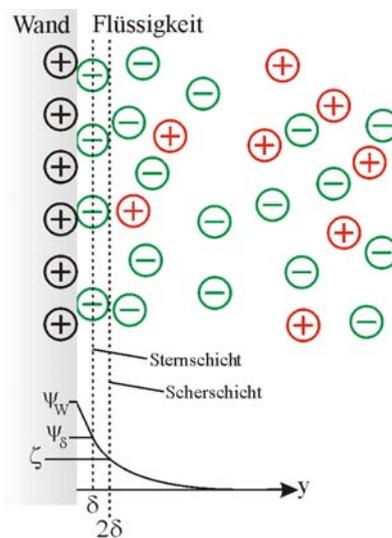


Abbildung 2.3: Stern-Modell.

Noch weiter entwickelte Modelle der EDL wie etwa das nach Gouy-Chapman-Stern-Grahame (GCSG) [20], das Modell von Bockris, Devanathan und Müller [7] oder Dreischicht-Modelle beschäftigen sich mit dem unmittelbar an die Festkörper-Oberfläche angrenzenden Bereich der Flüssigkeit und nehmen dort weitere Verfeinerungen und Aufteilungen in zusätzliche Schichten vor. Weiterhin wurde in der Vergangenheit angemerkt [21], daß die Annahme einer einfachen Boltzmann-Verteilung der Ionen

in der Flüssigkeit Effekte wie (i) die Verdrängung umgebender Teilchen aufgrund endlicher Ionenradien, (ii) die veränderliche Dielektrizitätskonstante der Flüssigkeit (dielektrische Sättigung), (iii) Ionenpolarisation oder (iv) den Einfluß der Ionenatmosphäre nicht berücksichtigt; diese Kritikpunkte gelten vornehmlich für hohe Ionenkonzentrationen. Auf diese Modelle soll hier nicht näher eingegangen werden.

2.3 Das Gouy-Chapman-Modell mit Debye-Hückel-Linearisierung

Die Elektrokinetik befaßt sich mit Flüssigkeitsströmungen, die von der EDL einer Phasengrenzfläche zwischen Festkörper-Oberfläche und einem Elektrolyten beeinflusst werden. Im überwiegenden Teil aller Arbeiten zu diesem Thema wird für die Modellierung der EDL das Modell nach Gouy und Chapman verwendet, siehe auch Kapitel 2.2. In der vorliegenden Arbeit werden die Einflüsse der EDL auf die hier untersuchten Strömungen ebenfalls nach diesem Ansatz modelliert, jedoch wird zusätzlich eine Vereinfachung vorgenommen, die als Debye-Hückel-Linearisierung bekannt ist. Im Folgenden soll die mathematische Modellbildung dargestellt werden.

Es wird ausgegangen von einer wäßrigen Lösung eines monovalenten, symmetrischen Elektrolyten wie $\text{NaCl} \rightleftharpoons \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$ oder $\text{KCl} \rightleftharpoons \text{K}^+ + \text{Cl}^-$, angrenzend an eine unendlich ausgedehnte Festkörper-Oberfläche aus einem elektrisch nichtleitenden Material wie Glas oder Kunststoff, welche eine homogen verteilte Oberflächenladung trägt. Das System soll sich im elektrochemischen Gleichgewicht befinden, und die Temperatur wird als konstant angenommen. Die Ionen werden als Punktladungen modelliert, und die Dielektrizitätskonstante des Elektrolyten soll konstant sein. Weitere Festkörper-Oberflächen sollen so weit entfernt sein, daß ihre elektrischen Doppelschichten diejenige der hier betrachteten Oberfläche nicht beeinflussen. Die Ionenpolarisation und der Einfluß der Eigenatmosphäre eines Ions werden vernachlässigt.

Innerhalb der EDL wird ein zusätzlicher Volumenkraftterm in die Navier-Stokes-Gleichungen eingehen, welcher von der lokal herrschenden, elektrischen Feldstärke \mathbf{E} abhängt. Diese kann direkt aus der Verteilung des elektrischen Potentials ψ abgeleitet werden, beschrieben durch die Poisson-Gleichung,

$$\Delta\psi = -\rho_e/\varepsilon_r\varepsilon_0 \quad . \quad (2.1)$$

ρ_e bedeutet die elektrische Netto-Ladungsdichte, ε_0 die Dielektrizitätskonstante des Vakuums und ε_r die relative Dielektrizitätskonstante des Elektrolyten. Da eine unendlich ausgedehnte Festkörper-Oberfläche betrachtet wird, läßt sich (2.1) auf die eindimensionale Form

$$\psi_{yy} = -\rho_e/\varepsilon_r\varepsilon_0 \quad , \quad (2.2)$$

reduzieren, wobei der Index \square_{yy} für die zweite Ableitung nach der wandnormalen Koordinate y steht. Es muß nun noch ein Ausdruck für die unbekannte Ladungsdichte ρ_e gefunden werden.

Da sich das System im elektrochemischen Gleichgewicht befindet, ist das elektrochemische Potential

$$\mu_i = kT \ln n_i + z_i e \psi \quad (2.3)$$

der Ionensorte i an jedem Ort y gleich. Dabei steht k für die Boltzmann-Konstante, T für die absolute Temperatur, n_i für die Dichte der Ionensorte i , z_i für die Valenz der Ionensorte i , und e für die Elementarladung. Somit läßt sich für das elektrochemische Potential an einem Punkt weit weg von der Festkörper-Oberfläche ($y \rightarrow \infty$), im Folgenden als Bulk bezeichnet, und für das elektrochemische Potential an einem Punkt innerhalb der EDL schreiben,

$$kT \ln n_i + z_i e \psi = kT \ln n_{i,\infty} + z_i e \psi_\infty \quad . \quad (2.4)$$

Der Einfachheit halber wird ψ_∞ ohne Einschränkung der Allgemeinheit zu Null gesetzt. Es ergibt sich dann eine Boltzmann-Verteilung für die Dichte der Ionensorte i , nämlich

$$n_i = n_{i,\infty} \exp(-z_i e \psi / kT) \quad . \quad (2.5)$$

Die Netto-Ladungsdichte ergibt sich aus der Summation der Verteilungen aller Ionensorten in der Flüssigkeit zu

$$\rho_e = \sum_i z_i e n_i = \sum_i z_i e n_{i,\infty} \exp(-z_i e \psi / kT) \quad . \quad (2.6)$$

Der Ausdruck (2.6) kann in die Poisson-Gleichung (2.2) eingesetzt werden, und es ergibt sich die sog. Poisson-Boltzmann-Gleichung

$$\psi_{yy} = - \sum_i \frac{z_i e n_{i,\infty}}{\epsilon_r \epsilon_0} \exp(-z_i e \psi / kT) \quad . \quad (2.7)$$

Diese Gleichung kann für monovalente, symmetrische Elektrolyte zwar noch analytisch gelöst werden [10, 19]; hier soll jedoch noch eine weitere Vereinfachung durchgeführt werden, welche unter dem Namen Debye-Hückel-Linearisierung bekannt ist [11]. Für kleine Argumente $z_i e \psi / kT$ kann die Exponentialfunktion in der Poisson-Boltzmann-Gleichung (2.7) mittels einer Taylor-Reihe gemäß

$$\exp(-z_i e \psi / kT) = 1 - z_i e \psi / kT + \dots \quad (2.8)$$

linearisiert werden. Anschaulich bedeutet dies, daß $z_i e \psi \ll kT$ ist, also die Stoffdiffusion über die elektrostatischen Kräfte dominiert; bei Raumtemperatur entspricht dies für einen monovalenten Elektrolyten einem Potential von etwa 25 mV. Es ergibt sich dann die linearisierte Poisson-Boltzmann-Gleichung,

$$\psi_{yy} = - \sum_i \frac{z_i e n_{i,\infty}}{\epsilon_r \epsilon_0} + \sum_i \frac{z_i^2 e^2 n_{i,\infty}}{kT \epsilon_r \epsilon_0} \psi \quad , \quad (2.9)$$

wobei der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.9) zu Null wird, da ja im Bulk der Flüssigkeit alle Ionensorten in gleicher Konzentration vorliegen, siehe Kapitel 2.2.

Gleichung (2.9) wird häufig vereinfacht geschrieben in der Form

$$\psi_{yy} = \kappa^2 \psi \quad , \quad (2.10)$$

mit

$$\kappa^2 = \sum_i \frac{z_i^2 e^2 n_{i,\infty}}{kT \varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (2.11)$$

als dem sog. Debye-Hückel-Parameter. Das Reziproke von κ wird als Debye-Länge l_D bezeichnet, $l_D = 1/\kappa$. Die Debye-Länge ist ein charakteristisches Maß für die Dicke der EDL, siehe auch Abbildung 2.2. Die Lösung der linearisierten Poisson-Boltzmann-Gleichung (2.10) mit den Randbedingungen

$$\psi(y=0) = \psi_W \quad , \quad (2.12)$$

$$\psi(y \rightarrow \infty) = 0 \quad , \quad (2.13)$$

lautet

$$\psi(y) = \psi_W \exp(-\kappa y) \quad . \quad (2.14)$$

Die detaillierte Herleitung dieser Lösung ist in Anhang A dargestellt.

Da die Poisson-Boltzmann-Gleichung in linearisierter Form (2.10) gelöst wird, muß auch die Ladungsdichte (2.6) linearisiert werden, so daß sich

$$\rho_e = - \sum_i \frac{z_i^2 e^2 n_{i,\infty}}{kT} \psi \quad (2.15)$$

ergibt. Die Lösung (2.14) für die Potentialverteilung in die Ladungsdichte (2.15) eingesetzt liefert

$$\rho_e = -\varepsilon_r \varepsilon_0 \kappa^2 \psi_W \exp(-\kappa y) \quad , \quad (2.16)$$

und mit der Identität $q_W = \varepsilon_r \varepsilon_0 \psi_W / l_D$ kommt

$$\rho_e = -\frac{q_W}{l_D} \exp(-y/l_D) \quad , \quad (2.17)$$

wobei q_W die Wandladungsdichte bezeichnet. Dieser Verlauf ist in Abbildung 2.4 für $l_D = 1 \mu\text{m}$ und $q_W = 0.03 \text{ C/m}^2$ dargestellt.

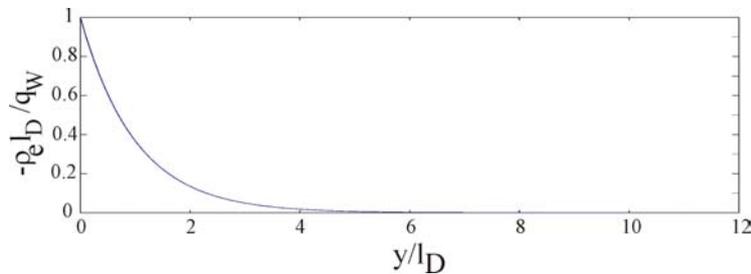


Abbildung 2.4: Verlauf der Netto-Ladungsdichte nach (2.17).

Es steht nun mit (2.17) ein Ausdruck zur Verfügung, mit dessen Hilfe man die Volumenkräfte modellieren kann, die aufgrund selbstinduzierter und/oder aufgrund von außen angelegter elektrischer Felder innerhalb der EDL auf die Strömung wirken.

Kapitel 3

Asymptotische Behandlung der elektrischen Doppelschicht

Nur in wenigen Fällen läßt sich für ein physikalisches Problem eine exakte Lösung angeben. Soll eine Lösung für eine komplexere Problemstellung gefunden werden, muß das ursprüngliche Problem oftmals so stark vereinfacht und einschränkende Annahmen unterworfen werden. Die Lösung ist dann in ihrem Gültigkeitsbereich merklich eingeschränkt, und nur für vereinzelte Spezialfälle können Aussagen gemacht werden. Aus diesem Grund sind Näherungslösungen in der mathematischen Physik von elementarer Bedeutung, da sie oft für eine größere Klasse von Problemen und für weite Parameterbereiche gültig sind.

Das hier zur Anwendung kommende Näherungsverfahren gehört zur Gruppe der asymptotischen Methoden [23, 28, 38, 45, 52]. In vielen Problemstellungen ist es nach geeigneter Skalierung der beschreibenden Grundgleichungen möglich, dominante Effekte zu identifizieren oder den Einfluß einzelner Terme vorab auf bestimmte Bereiche des Lösungsgebietes einzuschränken. Letzteres ist auch in der vorliegenden Arbeit der Fall. Wie in Kapitel 2 dargelegt, beschränkt sich das Phänomen der EDL auf eine dünne Schicht nahe der Wände, während im Bulk der Strömung der Einfluß der elektrischen Kräfte verschwindet. Dies spiegelt sich, wie später gezeigt wird, auch in der Skalierung der Grundgleichungen wider. Es können zwei Teilbereiche identifiziert werden; einerseits eine dünne, wandnahe Schicht, innerhalb derer die elektrischen Kräfte die Strömung stark beeinflussen, andererseits der übrige Teil des Strömungsgebietes, in welchem diese Kräfte vernachlässigbar sind. Jeder der beiden Teilbereiche kann separat behandelt werden, und insbesondere für die Strömung im wandnahen Bereich kann eine analytische Lösung abgeleitet werden.

Der Vorteil dieser Methode liegt für die hier zu simulierenden Kanalströmungen mit elektrischen Kräften darin, daß man anstelle der herkömmlichen Randbedingungen auf den Wänden im Rahmen der Asymptotik eine Anpassungsbedingung erhält, welche den Einfluß der elektrischen Kräfte auf die wandnahen Bereiche der Strömung berücksichtigt. Dadurch muß die EDL, deren Dicke auch in Mikrokanälen sehr viel geringer als die Kanalweite ist, in den numerischen Strömungssimulationen nicht explizit aufgelöst werden. Dies bedeutet eine drastische Reduktion der Rechenzeit, da innerhalb der sehr dünnen EDL kein feines Rechengitter benötigt wird.

Im Folgenden werden die Grundgleichungen vorgestellt, die das gestellte physikalische Problem beschreiben. Die Anwendung asymptotischer Methoden auf das Problem wird im Detail ausgeführt, insbesondere die Bestimmung der analytischen inneren Lösung für den wandnahen Bereich der Strömung und die Anpassung dieser Teillösung an den verbleibenden Rest des Strömungsgebietes.

3.1 Grundgleichungen

Es soll die Strömung einer inkompressiblen, Newtonschen Flüssigkeit in einer ebenen Geometrie unter Beeinflussung durch elektrische Felder simuliert werden, wobei ein wandtangenciales, wandnormales Koordinatensystem (x, y) zugrunde gelegt wird. Die Dichte ρ und die dynamische Viskosität μ der Flüssigkeit sowie die Temperatur werden als konstant angenommen. Die beschreibenden Grundgleichungen sind demzufolge die Kontinuitätsgleichung, die Navier-Stokes-Gleichungen mit den zusätzlichen elektrischen Volumenkrafttermen und die Gauß-Gleichung für das elektrische Feld. Es wird angenommen, daß das Gegenfeld, welches sich durch den konvektiven Transport von Ionen mit der Strömung aufbaut, siehe Kapitel 2.1, viel schwächer ist als das von außen angelegte elektrische Feld \mathbf{E} und als das selbstinduzierte Feld \mathbf{E}_0 , welches sich aufgrund der Nicht-Gleichverteilung der Ionen in der Flüssigkeit ausbildet. Somit kann diese Rückwirkung auf die elektrische Feldverteilung vernachlässigt werden, und die Berechnung des elektrischen Feldes kann a priori, entkoppelt von der Strömungsberechnung, erfolgen.

Die Ladungsdichte ρ_e in der Flüssigkeit läßt sich näherungsweise durch die Abhängigkeit (2.17) beschreiben. Durch diese Nicht-Gleichverteilung der Ladungsträger wird nach dem Gauß-Gesetz

$$\nabla \mathbf{E}_0 = \frac{\rho_e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (3.1)$$

ein selbstinduziertes elektrisches Feld $\mathbf{E}_0 = (E_{x0}, E_{y0})^T$ erzeugt. Da die Ladungsverteilung ρ_e nur von der Wandnormalenrichtung y abhängt, gibt es keine Feldkomponente E_{x0} in der wandtangentialen Richtung x , und das Gauß-Gesetz (3.1) kann vereinfacht geschrieben werden als

$$\frac{\partial}{\partial y} E_{y0} = \frac{\rho_e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad . \quad (3.2)$$

Dieser Ausdruck kann in y vom Bulk ($y \rightarrow \infty$) bis zu einem Punkt y in der EDL integriert werden und liefert mit der Randbedingung $E_{y0}(y \rightarrow \infty) = 0$ für das selbstinduzierte, wandnormale elektrische Feld die Beziehung

$$E_{y0} = \frac{qw}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \exp(-y/l_D) \quad . \quad (3.3)$$

Weiterhin wird angenommen, daß ein extern angelegtes elektrisches Feld $\mathbf{E} = (E_x, E_y)^T$ auf die Flüssigkeit wirkt, was in den Navier-Stokes-Gleichungen weitere Volumenkraftterme bedingt. Die dimensionsbehafteten Grundgleichungen für die Klasse der hier zu behandelnden Strömungsprobleme bei bekanntem elektrischen Feld lauten somit

$$u_x + v_y = 0 \quad , \quad (3.4)$$

$$\rho(u_t + uu_x + vv_y) = -p_x + \mu(u_{xx} + u_{yy}) + \rho_e E_x \quad , \quad (3.5)$$

$$\rho(v_t + uv_x + vv_y) = -p_y + \mu(v_{xx} + v_{yy}) + \rho_e E_y + \rho_e E_{y0} \quad . \quad (3.6)$$

Die Indizes t , x und y an den Geschwindigkeitskomponenten (u, v) und am Druck p stehen für partielle Ableitungen nach der Zeit t und den Koordinatenrichtungen

(x, y) . Auf den Wänden gilt die Haftbedingung

$$(u, v) = 0 \quad . \quad (3.7)$$

Über die Druckdifferenz zwischen Aus- und Einlaß,

$$\Delta p = p_{aus} - p_{ein} \quad , \quad (3.8)$$

kann der Massenstrom durch die Strömungsgeometrie eingestellt werden. Alternativ kann die direkte Vorgabe eines Einlaß-Geschwindigkeitsprofils,

$$(u, v)_{ein} = f(y) \quad , \quad (3.9)$$

in Kombination mit einer geeignet gewählten Auslaß-Randbedingung erfolgen. Hierfür bietet sich beispielsweise eine konvektive Ausström-Randbedingung

$$\begin{aligned} u_{t,aus} + u_0 u_{x,aus} &= 0 \quad , \\ v_{t,aus} + u_0 v_{x,aus} &= 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

nach [48] an; u_0 bedeutet eine mittlere Strömungsgeschwindigkeit. Wahlweise sind z.B. auch reine Neumann-Randbedingungen gemäß

$$(u_x, v_x)_{aus} = 0 \quad (3.11)$$

möglich.

Es ist an dieser Stelle von Vorteil, ein wandtangenciales/-normales Koordinatensystem (\bar{x}, \bar{y}) mit dem Ursprung auf der Wand einzuführen, da dann die Ladungsdichte (2.17) für die Modellierung der elektrischen Terme verwendet werden kann. Es kommen somit für diese die Ausdrücke

$$\rho_e E_x = -\frac{q_W E_{\bar{x}}}{l_D} \exp(-\bar{y}/l_D) \quad , \quad (3.12)$$

$$\rho_e E_y = -\frac{q_W E_{\bar{y}}}{l_D} \exp(-\bar{y}/l_D) \quad , \quad (3.13)$$

$$\rho_e E_{y0} = -\frac{q_W^2}{\varepsilon_r \varepsilon_0 l_D} \exp(-2\bar{y}/l_D) \quad . \quad (3.14)$$

Die Ausdrücke (3.12) und (3.13) beschreiben den Einfluß der wandtangentialen und wandnormalen Komponenten von außen angelegter elektrischer Felder auf die Strömung; der Term (3.14) steht für die Wirkung des selbstinduzierten elektrischen Feldes aufgrund der Nicht-Gleichverteilung der Ionen in der Flüssigkeit.

3.2 Entdimensionierung

Die Entdimensionierung der Gleichungen bringt die Terme (bis auf eventuell auftretende Vorfaktoren) in die Größenordnung ~ 1 , was zum einen Vorteile für die

numerische Lösung des Problems hat (schnellere Konvergenz der numerischen Verfahren, kleinere Rundungsfehler) und andererseits die Beurteilung der Wichtigkeit der einzelnen Terme anhand der Vorfaktoren ermöglicht. Es wird mit den Skalen

$$(X, Y) = \frac{(\bar{x}, \bar{y})}{d_0} \quad , \quad (3.15)$$

$$(U, V) = \frac{(\bar{u}, \bar{v})}{u_0} \quad , \quad (3.16)$$

$$P = \frac{\bar{p}d_0}{\mu u_0} \quad , \quad (3.17)$$

$$T = \frac{u_0}{d_0} t \quad (3.18)$$

entdimensioniert. Dabei steht d_0 für eine typische Längenskala des Problems, im vorliegenden Fall die Weite des Strömungskanals, und u_0 für die mittlere Geschwindigkeit der Strömung im Kanal. Die dimensionslose Form der Gleichungen lautet dann

$$U_X + V_Y = 0 \quad , \quad (3.19)$$

$$Re(U_T + UU_X + VU_Y) = -P_X + U_{XX} + U_{YY} - \delta^{-2}\Pi_{\bar{x}} \exp(-Y/\delta) \quad , \quad (3.20)$$

$$Re(V_T + UV_X + VV_Y) = -P_Y + V_{XX} + V_{YY} - \delta^{-2}\Pi_{\bar{y}} \exp(-Y/\delta) - \delta^{-2}\Pi_0 \exp(-2Y/\delta) \quad , \quad (3.21)$$

mit den dimensionslosen Kennzahlen

$$Re = \frac{u_0 d_0}{\nu} \quad , \quad (3.22)$$

$$\delta = \frac{l_D}{d_0} \ll 1 \quad , \quad (3.23)$$

$$\Pi_0 = \frac{q_W^2 l_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0 \mu u_0} > 0 \quad , \quad (3.24)$$

$$\begin{pmatrix} \Pi_{\bar{x}} \\ \Pi_{\bar{y}} \end{pmatrix} = \frac{q_W l_D}{\mu u_0} \begin{pmatrix} E_{\bar{x}} \\ E_{\bar{y}} \end{pmatrix} \quad . \quad (3.25)$$

Re ist die Kanal-Reynolds-Zahl, und δ ist ein Parameter, welcher das Verhältnis der Dicke der EDL zur Kanalweite beschreibt; auch in Mikroströmungen ist die EDL-Dicke in den meisten Fällen wesentlich geringer als die Kanalweite, weshalb δ sehr klein wird. Π_0 und $(\Pi_{\bar{x}}, \Pi_{\bar{y}})$ sind Verhältnisse von elektrischen zu viskosen Kräften.

3.3 Reskalierung

Aus den Gleichungen (3.19-3.21) wird klar, daß es offensichtlich zwei Längenskalen im Problem gibt. Alle Terme bis auf die elektrischen skalieren mit d_0 , während letztere auf der Längenskala l_D abfallen. Daher ist es naheliegend, das Problem mittels asymptotischer Methoden in Teilgebieten getrennt zu behandeln und die Teillösungen danach zu einer Gesamtlösung zu überlagern.

Einen Anhaltspunkt für die Art der Aufteilung des Lösungsgebietes bekommt man, wenn man sich vor Augen hält, daß die Exponentialfunktionen in den elektrischen Termen sehr schnell von dem Wert an der Wand auf Null in der Flüssigkeit abfallen; dieser Abfall vollzieht sich innerhalb einer sehr dünnen Schicht an der Wand (der EDL) von der Dicke $\sim l_D$. Die elektrischen Kräfte müssen nur in diesen dünnen, wandnahen Schichten überhaupt werden; im übrigen Strömungsgebiet können sie vernachlässigt werden. Diese Beschränkung der elektrischen Kräfte auf den Wandbereich rührt daher, daß nur im Wandbereich ein nennenswerter Überschuß von Ladungsträgern einer Sorte vorhanden ist, so daß nur hier die Netto-Ladungsträgerdichte ρ_e von Null verschieden ist; weit weg von der Wand sind alle Ladungsträgerarten in gleicher Konzentration in der Flüssigkeit vorhanden.

Im wandnahen Bereich ist die in Gleichung (3.15) eingeführte Skalierung für die wandnormale Richtung $Y = \bar{y}/d_0$ unpassend, weil die exponentiellen Verläufe der elektrischen Terme wie oben erwähnt mit l_D skalieren. Es wird daher die Reskalierung

$$\tilde{Y} = \frac{Y}{\delta} \quad , \quad (3.26)$$

$$\tilde{V} = \frac{V}{\delta} \quad , \quad (3.27)$$

der wandnormalen Richtung Y und der wandnormalen Geschwindigkeitskomponente V durchgeführt, was einer Längenskalierung mit der Dicke der EDL gleichkommt; dies kann anschaulich als Streckung der wandnormalen Koordinate interpretiert werden. Wird dies in die Gleichungen (3.19-3.21) eingeführt, so ergibt sich ein reskaliertes Satz von Gleichungen, nämlich

$$U_X + \tilde{V}_{\tilde{Y}} = 0 \quad , \quad (3.28)$$

$$Re(U_T + UU_X + \tilde{V}U_{\tilde{Y}}) = -P_X + U_{XX} + \delta^{-2}U_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \delta^{-2}\Pi_{\bar{x}}\exp(-\tilde{Y}) \quad , \quad (3.29)$$

$$Re(\tilde{V}_T + U\tilde{V}_X + \tilde{V}\tilde{V}_{\tilde{Y}}) = -\delta^{-2}P_{\tilde{Y}} + \tilde{V}_{XX} + \delta^{-2}\tilde{V}_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \delta^{-3}\Pi_{\bar{y}}\exp(-\tilde{Y}) - \delta^{-3}\Pi_0\exp(-2\tilde{Y}) \quad . \quad (3.30)$$

3.4 Innere Lösung

Im Bulk der Strömung können die Gleichungen (3.19-3.21) unter Vernachlässigung der elektrischen Terme numerisch gelöst werden und liefern die sog. äußere Lösung; nahe der Wand, innerhalb der EDL, beschreiben die Gleichungen (3.28-3.30) die sog. innere Lösung. Im Rahmen einer asymptotischen Behandlung erster Ordnung ist von diesen Gleichungen nur die führende Ordnung zu berücksichtigen; diese ist durch

$$U_X + \tilde{V}_{\tilde{Y}} = 0 \quad , \quad (3.31)$$

$$0 = U_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \Pi_{\bar{x}}\exp(-\tilde{Y}) \quad , \quad (3.32)$$

$$0 = -P_{\tilde{Y}} + \tilde{V}_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \delta^{-1}\Pi_{\bar{y}}\exp(-\tilde{Y}) - \delta^{-1}\Pi_0\exp(-2\tilde{Y}) \quad (3.33)$$

gegeben. Gleichung (3.32) beinhaltet (in der führenden Ordnung) ein Gleichgewicht aus elektrischen und Reibungskräften tangential zur Wand, und Gleichung (3.33) ein Gleichgewicht aus Druck-, Reibungs- und elektrischen Kräften normal zur Wand.

Das wandtangente Gleichgewicht (3.32) kann zweimal integriert werden, und mit der Haftbedingung auf der Wand ($\tilde{Y} = 0$) ergibt sich eine der beiden Integrationskonstanten zu $C_2 = -\Pi_{\bar{x}}$. Die andere Integrationskonstante C_1 bleibt (vorerst) unbestimmt, wodurch später eine Anpassung an die äußere Lösung ermöglicht wird. Somit findet man in wandtangentialer Richtung die Lösung

$$U_W = \Pi_{\bar{x}}(\exp(-\tilde{Y}) - 1) + C_1(X)\tilde{Y} \quad , \quad (3.34)$$

wobei C_1 allgemein noch von der wandtangentialen Koordinate X abhängen darf. Aus der Kontinuitätsgleichung (3.31) und der Lösung (3.34) ergibt sich für die wandnormale Geschwindigkeitskomponente \tilde{V} die Gleichung

$$\tilde{V}_{\tilde{Y}} = -C_{1,X}\tilde{Y} \quad , \quad (3.35)$$

wobei der Index $\square_{,X}$ die Ableitung nach der wandtangentialen Koordinate X bezeichnet. Nach Integration und Bestimmung der Integrationskonstanten zu Null mit Hilfe der Haftbedingung auf der Wand ($\tilde{Y} = 0$), erhält man als Lösung für die wandnormale Geschwindigkeitskomponente \tilde{V} den Ausdruck

$$\tilde{V}_W = -\frac{1}{2}C_{1,X}\tilde{Y}^2 \quad . \quad (3.36)$$

Wird dieser zweimal nach \tilde{Y} abgeleitet und in das wandnormale Gleichgewicht (3.33) eingesetzt, kommt

$$P_{\tilde{Y}} = -C_{1,X} - \delta^{-1}\Pi_{\bar{y}}\exp(-\tilde{Y}) - \delta^{-1}\Pi_0\exp(-2\tilde{Y}) \quad (3.37)$$

zur Bestimmung des Druckes P . Nach Integration findet man die Lösung

$$P_W = -C_{1,X}\tilde{Y} + \delta^{-1}\Pi_{\bar{y}}\exp(-\tilde{Y}) + \frac{1}{2}\delta^{-1}\Pi_0\exp(-2\tilde{Y}) + C_3(X) \quad . \quad (3.38)$$

Die Integrationskonstante C_3 darf allgemein noch von X abhängen.

3.5 Asymptotische Anpassung

Zur asymptotischen Anpassung verwenden wir die Methode nach [52]; die Anpassung erfolgt in führender Ordnung. Die Bulkströmung (äußere Lösung)

$$U_B(T, X, Y), V_B(T, X, Y), P_B(T, X, Y) \quad , \quad (3.39)$$

in gestreckten Koordinaten $(T, X, \delta\tilde{Y})$ dargestellt, lautet

$$U_B(T, X, \delta\tilde{Y}), V_B(T, X, \delta\tilde{Y}), P_B(T, X, \delta\tilde{Y}) \quad . \quad (3.40)$$

Wird der Grenzübergang nach $\delta \rightarrow 0$ betrachtet, so findet man

$$U_B(T, X, 0), V_B(T, X, 0), P_B(T, X, 0) \quad , \quad (3.41)$$

was einem unendlich dünnen inneren Lösungsgebiet, bzw. einer unendlich dünnen EDL, entspricht.

Die Beziehungen (3.34, 3.36, 3.38) liefern die wandnahen (inneren) Lösungen

$$U_W(T, X, \tilde{Y}), V_W(T, X, \tilde{Y}), P_W(T, X, \tilde{Y}) \quad (3.42)$$

für die Strömung innerhalb der EDL. In Bulkkoordinaten $(T, X, Y/\delta)$ dargestellt, lauten sie

$$U_W = \Pi_{\bar{x}}(\exp(-Y/\delta) - 1) + C_1(X)Y/\delta \quad , \quad (3.43)$$

$$V_W = -\frac{1}{2}C_{1,X}\delta^{-2}Y^2 \quad , \quad (3.44)$$

$$P_W = -C_{1,X}Y/\delta + \delta^{-1}\Pi_{\bar{y}}\exp(-Y/\delta) + \frac{1}{2}\delta^{-1}\Pi_0\exp(-2Y/\delta) + C_3(X) \quad . \quad (3.45)$$

Beim Grenzübergang $\delta \rightarrow 0$ wird deutlich, daß die freie Konstante $C_1(X)$ zu Null gewählt werden muß, damit die wandnahe Lösung (3.43-3.45) beschränkt und damit anpaßbar bleibt; daraus folgt außerdem $C_{1,X} = 0$, und es ergibt sich für den Grenzfall $\delta \rightarrow 0$

$$U_W = -\Pi_{\bar{x}} \quad , \quad (3.46)$$

$$V_W = 0 \quad , \quad (3.47)$$

$$P_W = C_3(X) \quad . \quad (3.48)$$

Für $\delta \rightarrow 0$ soll die wandnahe Lösung (3.46-3.48) in die Bulklösung (3.41) übergehen, so daß man das Ergebnis

$$U_B(T, X, 0) = -\Pi_{\bar{x}} \quad , \quad (3.49)$$

$$V_B(T, X, 0) = 0 \quad , \quad (3.50)$$

$$P_B(T, X, 0) = C_3(X) \quad , \quad (3.51)$$

erhält. Dies sind die Anpassungsbedingungen für die Bulkströmung. Am Rand des Gültigkeitsbereiches der Bulklösung gilt demnach nicht die Haftbedingung; stattdessen wird mit der Übergangsbedingung (3.49) ein endlicher Geschwindigkeitswert tangential zum Rand vorgegeben. Die Übergangsbedingung (3.50) besagt, daß innerhalb der dünnen, wandnahen Schicht keine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Wand auftritt.

Durch die asymptotische Behandlung der Wandschicht wird eine deutliche Vereinfachung bei der Berechnung der gesamten Kanalströmung erreicht. Wollte man den dünnen, wandnahen Bereich numerisch auflösen, so würde dies einen erheblichen Aufwand bedeuten, da das Rechengitter dort sehr fein sein müßte. Mit Hilfe der Übergangsbedingungen (3.49-3.51) werden die elektrischen Kräfte in der EDL

berücksichtigt, und die Wandschicht muß in der numerischen Berechnung nicht explizit aufgelöst werden.

Die wandnahe Lösung (3.34, 3.36, 3.38) lautet mit $C_1 = C_{1,X} = 0$ letztendlich

$$U_W = \Pi_{\bar{x}}(\exp(-\tilde{Y}) - 1) \quad , \quad (3.52)$$

$$V_W = 0 \quad , \quad (3.53)$$

$$P_W = \delta^{-1}\Pi_{\bar{y}}\exp(-\tilde{Y}) + \frac{1}{2}\delta^{-1}\Pi_0\exp(-2\tilde{Y}) + P_B(T, X, 0) \quad . \quad (3.54)$$

Die Überlagerung von innerer und äußerer Lösung liefert dann mit den Gleichungen (3.39), (3.49-3.51) und (3.52-3.54) die Gesamtlösung

$$U(T, X, Y) = U_B(T, X, Y) + U_W(T, Y) - U_B(T, X, 0) \quad , \quad (3.55)$$

$$V(T, X, Y) = V_B(T, X, Y) + V_W(T, Y) - V_B(T, X, 0) \quad , \quad (3.56)$$

$$P(T, X, Y) = P_B(T, X, Y) + P_W(T, Y) - P_B(T, X, 0) \quad . \quad (3.57)$$

Das ursprünglich elektrodynamische Problem wird mit Hilfe der Asymptotik auf ein rein hydrodynamisches reduziert. Die Strömung innerhalb der EDL wird mittels der Übergangsbedingungen (3.49, 3.50) auf eine repräsentative Geschwindigkeitsamplitude (3.49) reduziert, welche als Randbedingung für die numerische Berechnung der Bulkströmung dient; diese Vereinfachung ist eine Folge der asymptotischen Betrachtung, welche die EDL als unendlich dünne Wandschicht ansieht. Diese Randbedingung für die numerische Berechnung der Bulkströmung ergibt dann überall dort, wo lokal eine wandtangente Komponente des elektrischen Feldes vorliegt, eine endliche, wandtangente Geschwindigkeit.

3.6 Verifikation

Um die oben abgeleitete, asymptotische Behandlung zu testen, soll hier ein Vergleich zwischen der exakten Lösung einer Kanalströmung mit elektrischen Kräften und der Lösung, die mit Hilfe der asymptotischen Anpassung von zwei Teillösungen erhalten wird, angestellt werden [12].

3.6.1 Exakte Lösung

Es wird die stationäre, ausgebildete Strömung einer inkompressiblen, Newtonschen Flüssigkeit in einem geraden, ebenen Kanal der Länge L und der Weite d_0 unter Einfluß des selbstinduzierten (Π_0) und eines von außen angelegten elektrischen Feldes ($\Pi_{\bar{x}}, \Pi_{\bar{y}}$) betrachtet. Am Kanaleinlaß $X = 0$ soll der Druck $P = P_0$ anliegen, und am Auslaß $X = L$ der Druck $P = 0$; somit liegt über die Kanallänge L der Druckgradient $P_X = -P_0/L$ an. Die Kanalwände liegen bei $Y = \pm 1/2$; auf diesen wird die Haftbedingung angenommen, und die Strömung sei symmetrisch zur Kanal-Mittelachse bei $Y = 0$.

Um die exakte Lösung dieses Problems zu finden, müssen die vollen Erhaltungsgleichungen (3.19-3.21) analytisch gelöst werden. Wegen der Annahme einer ausgebildeten Strömung ($\partial/\partial X=0$) liefert die Kontinuitätsgleichung (3.19) $V_Y = 0$, und wegen der Haftbedingung kommt

$$V = 0 \quad . \quad (3.58)$$

Die Navier-Stokes-Gleichungen (3.20, 3.21) vereinfachen sich zu

$$0 = -P_X + U_{YY} - \delta^{-2}\Pi_{\bar{x}}[\exp(-(Y + 1/2)/\delta) + \exp((Y - 1/2)/\delta)] \quad , \quad (3.59)$$

$$0 = -P_Y - \delta^{-2}\Pi_{\bar{y}}[\exp(-(Y + 1/2)/\delta) + \exp((Y - 1/2)/\delta)] - \delta^{-2}\Pi_0[\exp(-2(Y + 1/2)/\delta) - \exp(2(Y - 1/2)/\delta)] \quad . \quad (3.60)$$

Hier ist bereits berücksichtigt, daß an beiden Kanalwänden bei $Y = \pm 1/2$ jeweils eine EDL existiert. Die Gleichungen (3.59, 3.60) können umgeschrieben werden zu

$$U_{YY} = P_X + 2\delta^{-2}\Pi_{\bar{x}}\exp(-1/2\delta)\cosh(Y/\delta) \quad , \quad (3.61)$$

$$P_Y = -2\delta^{-2}\Pi_{\bar{y}}\exp(-1/2\delta)\cosh(Y/\delta) + 2\delta^{-2}\Pi_0\exp(-1/\delta)\sinh(2Y/\delta) \quad . \quad (3.62)$$

Gleichung (3.61) kann zweimal integriert werden, und mit der Haftbedingung auf den Wänden und der Symmetriebedingung kommt für U die exakte Lösung

$$U = \frac{P_0}{2L}\left(\frac{1}{4} - Y^2\right) + 2\Pi_{\bar{x}}\exp(-1/2\delta)[\cosh(Y/\delta) - \cosh(1/2\delta)] \quad . \quad (3.63)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (3.63) beschreibt das aus der Poiseuille-Strömung bekannte, parabelförmige Profil der druckgetriebenen Kanalströmung. Dieses wird durch den zweiten Term modifiziert, welcher über $\Pi_{\bar{x}}$ von der wandtangentialen Komponente des extern angelegten elektrischen Feldes abhängt.

Gleichung (3.62) kann integriert werden, und nach Berücksichtigung der Druckrandbedingungen $P(X = 0) = P_0$ und $P(X = L) = 0$ ergibt sich für den Druck

$$P = \frac{P_0}{L}(L - X) - 2\delta^{-1}\Pi_{\bar{y}}\exp(-1/2\delta)\sinh(Y/\delta) + \delta^{-1}\Pi_0\exp(-1/\delta)\cosh(2Y/\delta) \quad . \quad (3.64)$$

Die Ausdrücke (3.58, 3.63, 3.64) stellen die exakte Lösung des gegebenen Strömungsproblems dar, mit welcher die Näherungslösung verglichen werden soll.

3.6.2 Näherungslösung

Die Näherungslösung geht im Kernbereich (äußere Lösung) von den herkömmlichen Navier-Stokes-Gleichungen ohne elektrische Terme,

$$U_X + V_Y = 0 \quad , \quad (3.65)$$

$$Re(U_T + UU_X + VU_Y) = -P_X + U_{XX} + U_{YY} \quad , \quad (3.66)$$

$$Re(V_T + UV_X + VV_Y) = -P_Y + V_{XX} + V_{YY} \quad , \quad (3.67)$$

aus, denn diese werden ja über die Randbedingungen berücksichtigt. Es werden dieselben Annahmen und Vereinfachungen getroffen wie bei der Herleitung der exakten Lösung, doch die kinematischen Randbedingungen kommen jetzt aus den asymptotisch abgeleiteten Übergangsbedingungen (3.49, 3.50) und der Symmetriebedingung in der Kanalmitte bei $Y = 0$; die Haftbedingung auf den Wänden darf für die Kernlösung natürlich nicht verwendet werden. Aus der Kontinuitätsgleichung (3.65) und der Übergangsbedingung (3.50) ergibt sich für die Geschwindigkeit in Kanal-Querrichtung

$$V_B = 0 \quad . \quad (3.68)$$

Die Gleichungen (3.66, 3.67) vereinfachen sich somit zu

$$0 = -P_X + U_{YY} \quad , \quad (3.69)$$

$$0 = -P_Y \quad . \quad (3.70)$$

Die Impulsbilanz in Kanalrichtung X , Gleichung (3.69), kann zweimal integriert werden und liefert zusammen mit der Symmetriebedingung und der Übergangsbedingung (3.49) die Lösung

$$U_B = \frac{P_0}{2L} \left(\frac{1}{4} - Y^2 \right) - \Pi_{\bar{x}} \quad (3.71)$$

für die Geschwindigkeit in Kanal-Längsrichtung. Der erste Term auf der rechten Seite von (3.71) ist identisch mit dem ersten Term der exakten Lösung (3.63) und beschreibt den rein hydrodynamischen Anteil der Strömung. Der zweite Term verschiebt das Parabelprofil um den Wert $-\Pi_{\bar{x}}$, was letztlich Rutschen an der EDL infolge der elektrischen Kräfte bedeutet. Für den Druck kommt

$$P_B = \frac{P_0}{L} (L - X) \quad . \quad (3.72)$$

Dieses Ergebnis stimmt mit dem ersten Term der exakten Lösung (3.64) überein und beschreibt den linearen Druckverlauf einer ausgebildeten Kanalströmung. Anders als in Gleichung (3.64) hängt dieser hier nicht von der Kanal-Querrichtung Y ab, was direkt aus der Impulsbilanz (3.70) in Y -Richtung folgt.

Die Gleichungen (3.68, 3.71, 3.72) stellen die äußere Lösung, basierend auf den asymptotisch abgeleiteten Übergangsbedingungen, dar. Diese Lösung beschreibt die Strömung im Bulk der Flüssigkeit; die analytische innere Lösung (3.52-3.54) muß dieser noch überlagert werden, um das gesamte Strömungsfeld zu erhalten. Die entsprechenden inneren Lösungen an der oberen und der unteren Wand lauten

$$U_{W,oben} = \Pi_{\bar{x}} (\exp((Y - 1/2)/\delta) - 1) \quad , \quad (3.73)$$

$$U_{W,unten} = \Pi_{\bar{x}} (\exp(-(Y + 1/2)/\delta) - 1) \quad . \quad (3.74)$$

In Abbildung 3.1 sind für die axiale Geschwindigkeit U die exakte Lösung (3.63), die Bulklösung (3.71) sowie die Überlagerung aus Bulklösung (3.71) und Wandlösungen (3.73, 3.74) gegenübergestellt; zur Veranschaulichung sind die beiden Wandlösungen (3.73, 3.74) für die beiden Kanalwände auch separat gezeigt. Die für die Darstellung

gewählten Parameterwerte sind $\delta = 2 \cdot 10^{-2}$, $\Pi_{\bar{x}} = 6 \cdot 10^4$, $P_0/2L = 5 \cdot 10^5$. Die Pfeile deuten die Richtung der wirkenden Kräfte an; F_p steht für die im Bulk der Strömung dominierenden hydrodynamischen Druckkräfte, während $F_{\Pi_{\bar{x}}}$ die Richtung der von außen aufgeprägten elektrischen Kräfte angibt. Diese wirken für die gewählten Parameterwerte entgegen den Druckkräften, so daß in Wandnähe eine Strömung entgegen der Bulkströmung entsteht. Wie für kleine Werte δ erwartet, gibt die Bulklösung den Kernbereich der Strömung gut wieder; im wandnahen Bereich wird durch die Überlagerung aus Bulk- und Wandlösung eine sehr gute Übereinstimmung mit der exakten Lösung deutlich. Je dünner die EDL ist (kleine δ), desto größer wird der Bereich, in welchem die Bulklösung alleine bereits eine gute Näherung darstellt. Im hier diskutierten, linearen Problem (ausgebildete Strömung) führt die Überlagerung der Teillösungen (3.71) und (3.73, 3.74) identisch auf die exakte Lösung (3.63).

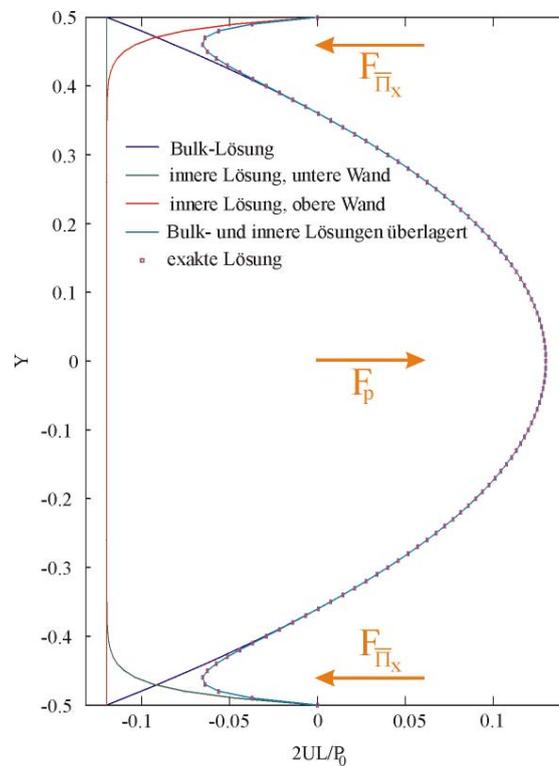


Abbildung 3.1: Gegenüberstellung von exakter Lösung und Näherungslösung für die elektrisch beeinflusste Kanalströmung.

Die exakte Lösung (3.64) für den Druck im Strömungskanal enthält zwei Terme, welche die Abhängigkeit des Druckfeldes von der wandnormalen Richtung Y beschreiben. Der erste Term steht für den Einfluß der wandnormalen Komponente in Y -Richtung eines von außen angelegten elektrischen Feldes, und der zweite für das selbstinduzierte elektrische Feld, welches sich aufgrund der Nicht-Gleichverteilung der Ionen in der EDL ausbildet. Der erste Term hat einen zur Kanal-Mittelachse ($Y = 0$) punktsymmetrischen Verlauf, weshalb die Y -Komponente eines äußeren elektrischen Feldes an der einen Wand einen Druckanstieg und an der anderen Wand einen Druckabfall bewirkt, siehe Abbildung 3.2a. Der zweite Term ist spiegelsymmetrisch zur Kanal-Mittelachse und immer positiv, wie Definition (3.24) zeigt; dies

bedeutet, daß die Nicht-Gleichverteilung der Ionen in der Flüssigkeit immer einen Druckanstieg zu den Wänden hin verursacht, vgl. Abbildung 3.2b. In Abbildung 3.2 haben die Parameter die Werte $\Pi_{\bar{y}} = 6 \cdot 10^4$, $\Pi_0 = 2.6 \cdot 10^4$, $\Pi_0/\delta = 1.3 \cdot 10^6$. Der Pfeil zeigt die Richtung der äußeren elektrischen Kräfte $F_{\Pi_{\bar{y}}}$ an, welche für die gewählten Parameter von der oberen zur unteren Kanalwand weisen. Dementsprechend ergibt sich an der oberen Wand ($Y = 0.5$) ein Druckabfall, während an der unteren Wand ($Y = -0.5$) ein Druckanstieg entsteht.

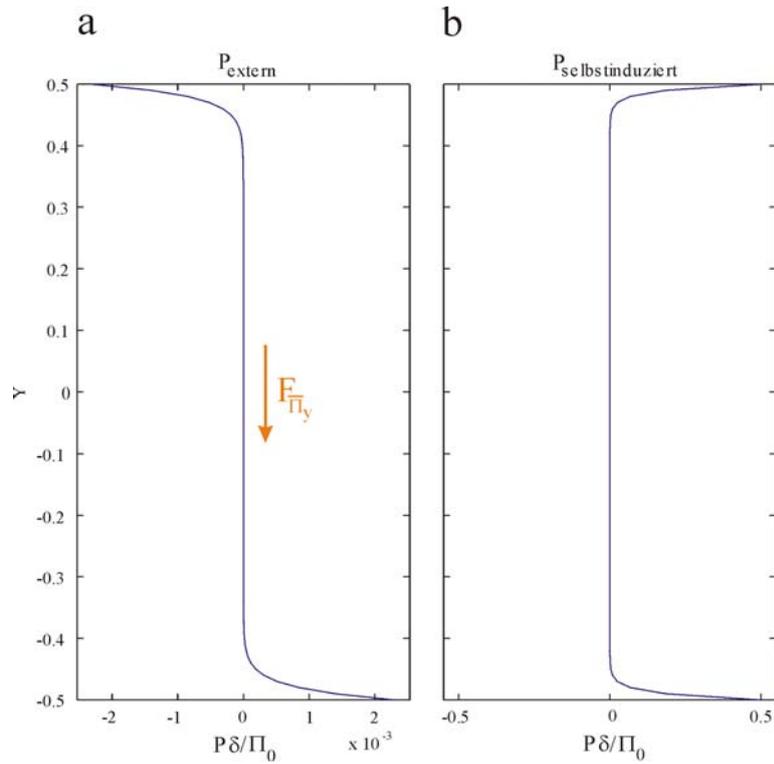


Abbildung 3.2: (a) Extern verursachter und (b) selbstinduzierter Druckanteil für die elektrisch beeinflusste Kanalströmung.

Kapitel 4

Niedrigdimensionales Modell

4.1 Grundprinzip

Das Lösen komplexer Differentialgleichungssysteme wie der Navier-Stokes-Gleichungen bedeutet in der Regel einen erheblichen numerischen Aufwand. Um ein Strömungsproblem räumlich ausreichend fein aufzulösen, wird oftmals eine große Anzahl von Gitterpunkten benötigt. Dies gilt insbesondere für dünne Grenzschichten wie die in Kapitel 2 und 3 diskutierte elektrische Doppelschicht, und der Aufwand vervielfacht sich noch bei der Berechnung einer zeitabhängigen Strömung. Eine Klasse von Näherungsverfahren, die hier Abhilfe schaffen kann, bilden die Methoden der gewichteten Residuen. Dabei wird die gesuchte Lösung $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ eines Differentialgleichungssystems

$$L(\mathbf{u}) = 0 \quad (4.1)$$

durch einen Reihenansatz

$$\mathbf{u}_a = \sum_{n=1}^N \mathbf{a}_n \varphi_n \quad (4.2)$$

approximiert, wobei die Ansatzfunktionen φ_n üblicherweise die Abhängigkeiten der gesuchten Lösung \mathbf{u} von den Ortskoordinaten \mathbf{x} enthalten; ist \mathbf{u} auch eine Funktion der Zeit t , so werden die Reihenkoeffizienten $a_n(t)$ zeitabhängig. L steht für den (nicht)linearen Differentialgleichungsoperator. Bilden die Ansatzfunktionen ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem, geht der Reihenansatz (4.2) für $N \rightarrow \infty$ in die exakte Lösung \mathbf{u} über. Wird der Ansatz jedoch für ein endliches N in die Differentialgleichung (4.1) eingesetzt, wird diese nicht mehr exakt erfüllt, sondern es verbleibt im Gegensatz zu Gleichung (4.1) ein Fehler, das Residuum

$$R = L(\mathbf{u}_a) \quad (4.3)$$

Die noch unbestimmten Koeffizienten \mathbf{a}_n aus dem Reihenansatz (4.2) werden so angepaßt, daß das Residuum möglichst klein wird. Dies geschieht, indem das innere Produkt aus Residuum und einer Gewichtungsfunktion w_n zu Null gesetzt wird, gemäß der Vorschrift

$$(w_n, R) = 0 \quad , n = 1, \dots, N \quad (4.4)$$

Dabei ist das innere Produkt zweier Funktionen $u(x), v(x)$ bezüglich einer Wichtungsfunktion $w(x)$ definiert als

$$(u(x), v(x)) = \int_a^b w(x)u(x)v(x)dx \quad (4.5)$$

Beim Galerkin-Verfahren werden als Sonderfall die Gewichtungsfunktionen w_n gerade wie die Ansatzfunktionen φ_n gewählt. Vorschrift (4.4) liefert ein algebraisches Gleichungssystem für die unbekanntenen Koeffizienten \mathbf{a}_n , wenn alle Abhängigkeiten der unbekanntenen Lösung u in den Ansatzfunktionen φ_n modelliert werden. Wie oben erwähnt wird eine Zeitabhängigkeit oftmals in die Koeffizienten \mathbf{a}_n übertragen, weshalb die Vorschrift (4.4) dann ein Anfangswertproblem für die zeitabhängigen Koeffizienten \mathbf{a}_n definiert. Die Ersparnis an Rechenaufwand liegt darin, daß bei geeigneter Wahl der Ansatzfunktionen φ_n die exakte Lösung \mathbf{u} schon für kleines N , also mit wenigen Moden (niedrigdimensional), gut wiedergegeben werden kann. Das aus Vorschrift (4.4) resultierende (Differential-)Gleichungssystem ist dann klein, und es wird zu seiner Lösung nur wenig Rechenzeit benötigt.

4.2 Niedrigdimensionales Modell für oszillierende Kanalströmungen

Wie in Kapitel 1.2 erläutert, ergibt sich für einen elektrisch erregten Mikromischer mit internem Hindernis eine Kanal-Innenströmung, welche quer zur Hauptströmungsrichtung oszilliert. Auf diese Weise soll die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten aufgefaltet und vergrößert werden, um den diffusiven Mischvorgang auf molekularer Ebene effizienter zu gestalten. Um die Berechnung solcher Strömungen zu beschleunigen, wird in diesem Kapitel ein niedrigdimensionales Modell abgeleitet, beschränkt auf zweidimensionale, inkompressible, zeitabhängige Strömungen Newtonscher Flüssigkeiten auf Basis der herkömmlichen Navier-Stokes-Gleichungen

$$U_X + V_Y = 0 \quad , \quad (4.6)$$

$$Re(U_T + UU_X + VU_Y) = -P_X + U_{XX} + U_{YY} \quad , \quad (4.7)$$

$$Re(V_T + UV_X + VV_Y) = -P_Y + V_{XX} + V_{YY} \quad . \quad (4.8)$$

Als Näherung für die oszillierend Mischer-Strömung wird eine Kanal-Innenströmung mit zeitperiodischem Einströmprofil verwendet. Dabei wird eine gewisse Idealisierung der echten Mischer-Strömung vorgenommen, damit mit wenigen Moden (bis sechs Moden im Ort und bis vier Moden in der Zeit) die Modellströmung berechnet werden kann. Dies erlaubt mit geringem Zeitaufwand zur Berechnung der Strömung die Ableitung und den Test eines Kriteriums zur Mischungsbewertung. Es ist zu betonen, daß hier keine elektrischen Kräfte auf die Strömung zu berücksichtigen sind; vielmehr wird der oszillierende Charakter der Kanal-Innenströmung nachgebildet, was über die oben erwähnte, oszillierende Einströmrandbedingung realisiert wird.

Ausgehend von der in Abbildung 4.1a dargestellten Situation (Kanal-Innenströmung mit internem Hindernis) wird das Simulationsgebiet entlang der roten, gestrichelten Linie abgeschnitten. Dies ist notwendig, um eine möglichst einfache, rechteckige Geometrie zu erhalten, auf welche das globale Galerkin-Verfahren angewendet werden kann, siehe Abbildung 4.1b.

Um den Druck aus dem Problem zu eliminieren, wird die doppelte Rotation auf die Impulsgleichungen (4.7, 4.8) angewendet, und man erhält zwei Gleichungen vierter

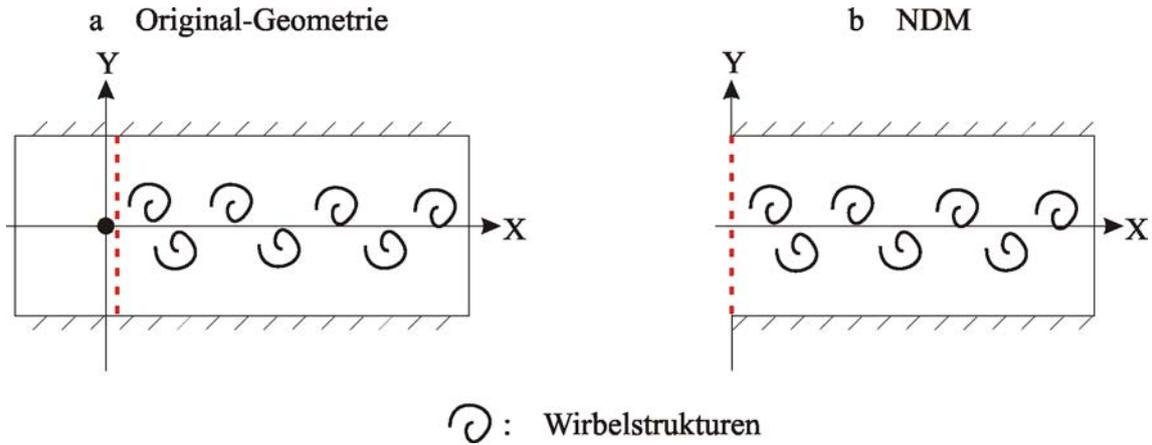


Abbildung 4.1: Vereinfachte Geometrie für das niedrigdimensionale Modell.

Ordnung

$$\begin{aligned}
& V_{XYT} - U_{YYT} + U(V_{XXY} - U_{XYT}) + V(V_{XYT} - U_{YYT}) \\
& \quad + Re^{-1}(U_{XXYT} + U_{YYTY} - V_{XXXY} - V_{XYTY}) \\
& \quad + U_X(V_{XY} - U_{TY}) + U_Y(V_{XX} - V_{TY} - 2U_{XY}) \\
& \quad \quad + V_X(U_{XY} + V_{TY}) + V_Y(2V_{XY} - 2U_{TY}) = 0 \quad , \quad (4.9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& U_{XYT} - V_{XXT} + V(U_{XYT} - V_{XXT}) + U(U_{XXY} - V_{XXY}) \\
& \quad + Re^{-1}(V_{XXYT} + V_{XXXY} - U_{XYTY} - U_{XXTY}) \\
& \quad + V_Y(U_{XY} - V_{XX}) + V_X(U_{TY} - U_{XX} - 2V_{XY}) \\
& \quad \quad + U_Y(V_{XY} + U_{XX}) + U_X(2U_{XY} - 2V_{XX}) = 0 \quad . \quad (4.10)
\end{aligned}$$

Die Ansätze für die gesuchten Geschwindigkeitskomponenten U und V lauten

$$U(T, X, Y) = \sum_{m=1}^M \varphi_m(Y) \sum_{k=0}^K \psi_k(T) p_{mk}(X) \quad , \quad (4.11)$$

$$V(T, X, Y) = \sum_{m=1}^M \varphi_m(Y) \sum_{k=0}^K \psi_k(T) q_{mk}(X) \quad . \quad (4.12)$$

Offensichtlich wird die Abhängigkeit der gesuchten Größen von der Kanal-Quer-richtung Y über die Ansatzfunktionen $\varphi_m(Y)$ modelliert, wobei jede für sich die Randbedingungen auf den Kanalwänden erfüllen muß. Wie weiter unten erläutert, kann wegen der periodischen Einströmung ein streng periodisches Verhalten in der Zeit T erwartet werden, weshalb für die $\psi_k(T)$ ein Fourieransatz für die Zeitabhängigkeit gewählt wird. Die Ansatzfunktionen lauten somit (die indizierte Größe T_m steht das m -te Chebyshev-Polynom erster Art, und nicht für die Zeit T !)

$$\psi_k(T) = \exp(ikT) = \cos(kT) + i \sin(kT) \quad , k = 0, \dots, K \quad , \quad (4.13)$$

$$\varphi_m(Y) = T_{m+1}(Y) - T_{m-1}(Y) \quad , m = 1, \dots, M \quad . \quad (4.14)$$

Wegen der komplexen Darstellung der Ansatzfunktionen $\psi_k(T)$ werden auch die Reihenkoeffizienten $p_{mk}(X)$ und $q_{mk}(X)$ in den Ansätzen (4.11, 4.12) komplex. Die

Kombination $T_{m+1}(Y) - T_{m-1}(Y)$ garantiert, daß jede Ansatzfunktion $\varphi_m(Y)$ für sich die Randbedingung auf den Kanalwänden erfüllt. Um ein System orthonormaler Funktionen zu erhalten, werden die Ansatzfunktionen φ_m gemäß [4] mit der sog. Gram-Schmidt-Orthogonalisierung (GS) modifiziert, unter Verwendung der Wichtungsfunktion 1; es handelt sich hierbei um eine rekursive Vorschrift, welche die Ansatzfunktionen geeignet renormiert, so daß sie linear unabhängig voneinander werden. Die ersten vier Ansatzfunktionen φ_1 bis φ_4 , zusammen mit den orthonormierten Ansatzfunktionen $\varphi_{1,GS}$ bis $\varphi_{4,GS}$, sind in Abbildung 4.2 dargestellt.

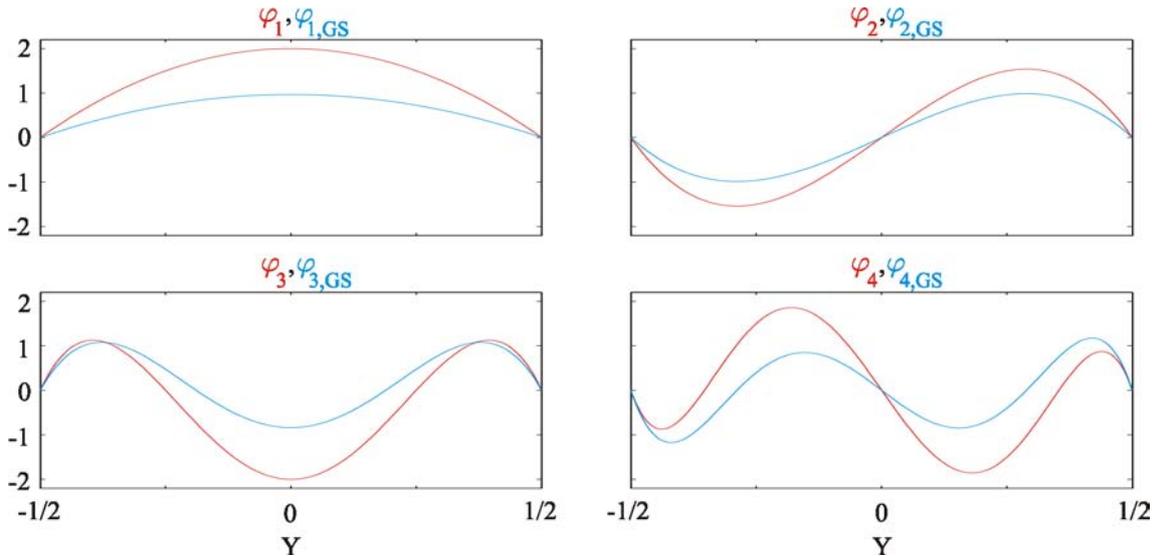


Abbildung 4.2: Die ersten vier Ansatzfunktionen für die Abhängigkeit der gesuchten Geschwindigkeitskomponenten (U, V) von der Kanal-Querrichtung Y .

Die Abhängigkeit der Lösungen von der Kanal-Längsrichtung X findet sich in den Reihenkoeffizienten $p_{mk}(X)$ und $q_{mk}(X)$, welche mittels des Galerkin-Verfahrens zu bestimmen sind. Entgegen der meist üblichen Vorgehensweise (Ortsabhängigkeiten modelliert, Zeitabhängigkeit in den Koeffizienten) werden hier die Abhängigkeiten von der Ortskoordinate Y und von der Zeit T modelliert. Nach Einsetzen der Ausdrücke (4.11, 4.12) in die X -Impulsbilanz (4.9) erhält man so eine Differentialgleichung, welche die unbekanntenen Reihenkoeffizienten $p_{mk}(X)$ und $q_{mk}(X)$ enthält. Nach Eliminierung der $q_{mk}(X)$ aus dem Problem mittels der Kontinuitätsgleichung (4.6) und Anwendung des Galerkin-Verfahrens ergibt sich für die unbekanntenen Koeffizienten $p_{mk}(X)$ ein nichtlineares Randwertproblem in X . Dieses muß im allgemeinen numerisch gelöst werden, und nachfolgend können die Koeffizienten $q_{mk}(X)$ aus den Koeffizienten $p_{mk}(X)$ bestimmt werden. Im letzten Schritt wird das gesuchte Geschwindigkeitsfeld gemäß (4.11, 4.12) aus den numerisch ermittelten Reihenkoeffizienten $p_{mk}(X)$, $q_{mk}(X)$ und den Ansatzfunktionen in Y und T rekonstruiert.

Auf den Kanalwänden ($Y = \pm 1/2$) soll die herkömmliche Haftbedingung

$$(U, V) = 0 \quad (4.15)$$

gelten, was auch aus Abbildung 4.2 deutlich wird; wie oben erwähnt, erfüllt jede Ansatzfunktion für sich diese Randbedingung. Am Auslaß wird eine konvektive

Ausström-Randbedingung

$$\begin{aligned} U_T + U_\infty U_X &= 0 \quad , \\ V_T + U_\infty V_X &= 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

nach [48] verwendet. Am Einströmrand wird die Geschwindigkeit in Kanal-Längsrichtung X zu

$$U(Y) = \hat{A}\varphi_1 = \hat{A}_{GS}\varphi_{1,GS} \quad (4.17)$$

gewählt, wobei über den Parameter \hat{A} bzw. \hat{A}_{GS} die Amplitude (der Volumenstrom) des Einströmprofils eingestellt wird. Um die oszillierende Umströmung des Hindernisses in der Original-Geometrie, Abbildung 4.1a, auch in die vereinfachte Geometrie abzubilden, wird am Einströmrand (vgl. Abbildung 4.1b) eine in der Zeit oszillierende Geschwindigkeit in Kanal-Querrichtung $V(Y, T)$ angesetzt, nämlich $V(Y, T) = \hat{B}\varphi_1 \sin(\Omega_k T)$, mit der dimensionslosen Anregungsfrequenz $\Omega_k = \omega_k d_0 / u_0$, oder (\mathfrak{S} kennzeichnet den Imaginärteil)

$$V(Y, T) = \hat{B}\varphi_1 \mathfrak{S}(\psi_k) = \hat{B}_{GS}\varphi_{1,GS} \mathfrak{S}(\psi_k) \quad . \quad (4.18)$$

Über den Parameter \hat{B} bzw. \hat{B}_{GS} kann die Amplitude der Oszillation gewählt werden, und die Anregungsfrequenz wird über Ω_k festgelegt. Die Ansätze (4.11, 4.12) für die gesuchten Geschwindigkeiten werden in die Randbedingungen (4.15-4.18) eingesetzt, um nach Anwendung des Galerkin-Verfahrens und Eliminierung der Koeffizienten $q_{mk}(X)$ mittels der Kontinuitätsgleichung Randbedingungen für die Berechnung der Reihenkoeffizienten $p_{mk}(X)$ zu erhalten. Das Gleichungssystem für die Reihenkoeffizienten, hergeleitet mit dem Galerkin-Verfahren, kann vollständig analytisch behandelt werden; dafür wird in dieser Arbeit das Computeralgebra-System MAPLE verwendet. Die numerische Lösung des resultierenden Differentialgleichungssystems wurde mit Hilfe der numerischen Mathematik-Software MATLAB berechnet, welche ein Finite-Differenzen-Verfahren zur Lösung des Randwertproblems verwendet [51].

Abbildung 4.3 zeigt numerisch berechnete Koeffizientenverläufe für zwei Kanal-Reynolds-Zahlen ($Re = 10, 30$) und zwei Anregungsamplituden ($\hat{B} = 1, 2$). Es wurden vier Moden im Ort ($M = 4$) und fünf Moden in der Zeit ($K = 4$) zugelassen. Das Rechengebiet erstreckt sich vier Kanalweiten d_0 stromab, von $X = 0$ (Einströmung) bis $X = 4$ (Ausströmung). Die Abbildungen 4.3a und 4.3e zeigen die Koeffizientenverläufe $p_{mk}(X)$ und $q_{mk}(X)$ der Reihenansätze für die Geschwindigkeiten U gemäß Gleichung (4.11) und V gemäß Gleichung (4.12) für die Parameterkombination ($Re = 10, \hat{B} = 1$). Die Abbildungen 4.3b und 4.3f zeigen analog die Koeffizienten für ($Re = 10, \hat{B} = 2$), die Abbildungen 4.3c und 4.3g für ($Re = 30, \hat{B} = 1$), und die Abbildungen 4.3d und 4.3h für ($Re = 30, \hat{B} = 2$). Die oszillierende Anregung der Kanalströmung wird über den Mode $\mathfrak{S}(q_{12})$ aus dem Reihenansatz (4.12) eingebracht, oder in der Einström-Randbedingung (4.18) ausgedrückt, $k = 2$. Die Amplitude des orthonormierten Einströmprofils ist $\hat{A}_{GS} = 2.06$, und die Amplituden der orthonormierten Queroszillation sind $\hat{B}_{GS} = 2.06$ bzw. 4.13. Diese nicht-ganzzahligen Werte kommen durch die Gram-Schmidt-Orthogonalisierung zustande, siehe auch Abbildung 4.3 bei $X = 0$. Einige ausgewählte Koeffizientenverläufe sind

mit Bezeichnungen versehen, um einen Vergleich der verschiedenen Parameterkombinationen (Re, \hat{B}) zu ermöglichen. Zur Orientierung ist der Koeffizient $\mathfrak{S}(q_{12})$, welcher die Queroszillation einbringt, in den Abbildungen 4.3e-h in rot bezeichnet. Es wird deutlich, daß eine größere Amplitude \hat{B} der Queroszillation eine stärker schwingende Strömung verursacht, die Abklinglänge der eingebrachten Störung aber nicht wesentlich vergrößert; für beide Anregungsamplituden $\hat{B} = 1$, $\hat{B} = 2$ ist die Oszillation ab etwa $X \simeq 2$ verschwunden. Eine Erhöhung der Reynolds-Zahl von $Re = 10$ auf $Re = 30$ hingegen hat offensichtlich eine größere Abklinglänge zur Folge. Weiterhin werden durch den anregenden Mode $\mathfrak{S}(q_{12})$ über die stärkere nichtlineare Kopplung (größere Reynolds-Zahl) auch andere Moden stärker angeregt, vgl. etwa der nächsthöhere harmonische Mode q_{32} .

Aus diesen Koeffizientenverläufen lassen sich nun die Geschwindigkeitsfelder $\mathbf{V}(T, X, Y)$ gemäß der Ansätze (4.11, 4.12) rekonstruieren. In Abbildung 4.4 sind diese für dieselben Parameterkombinationen wie in Abbildung 4.3 für einen willkürlich gewählten Zeitpunkt T_0 , $\mathbf{V}(T_0, X, Y)$, dargestellt. Es bestätigt sich, was auch schon die Koeffizientenverläufe aus Abbildung 4.3 vermuten lassen: Höhere Anregungsamplituden bewirken höhere Geschwindigkeiten, und die Abklinglänge der am Einlaß eingebrachten Queroszillation wächst mit wachsender Reynolds-Zahl.

Die analytische Herleitung der Koeffizientengleichungen in MAPLE wird aufwendiger, je mehr Moden in Y und T zugelassen werden. Zugleich wird auch die numerische Lösung des Gleichungssystems für die Koeffizienten in MATLAB immer aufwendiger. Bei den hier zu erwartenden, relativ niedrigen Reynolds-Zahlen ist jedoch nicht damit zu rechnen, daß es zu einer starken nichtlinearen Kopplung und damit zu merklichen Anteilen in höheren Moden kommt. Essentielle dynamische Eigenschaften des betrachteten Problems werden somit nicht vernachlässigt, weshalb für kleine Reynolds-Zahlen die Verwendung des beschriebenen Niedrigmoden-Ansatzes gerechtfertigt ist.

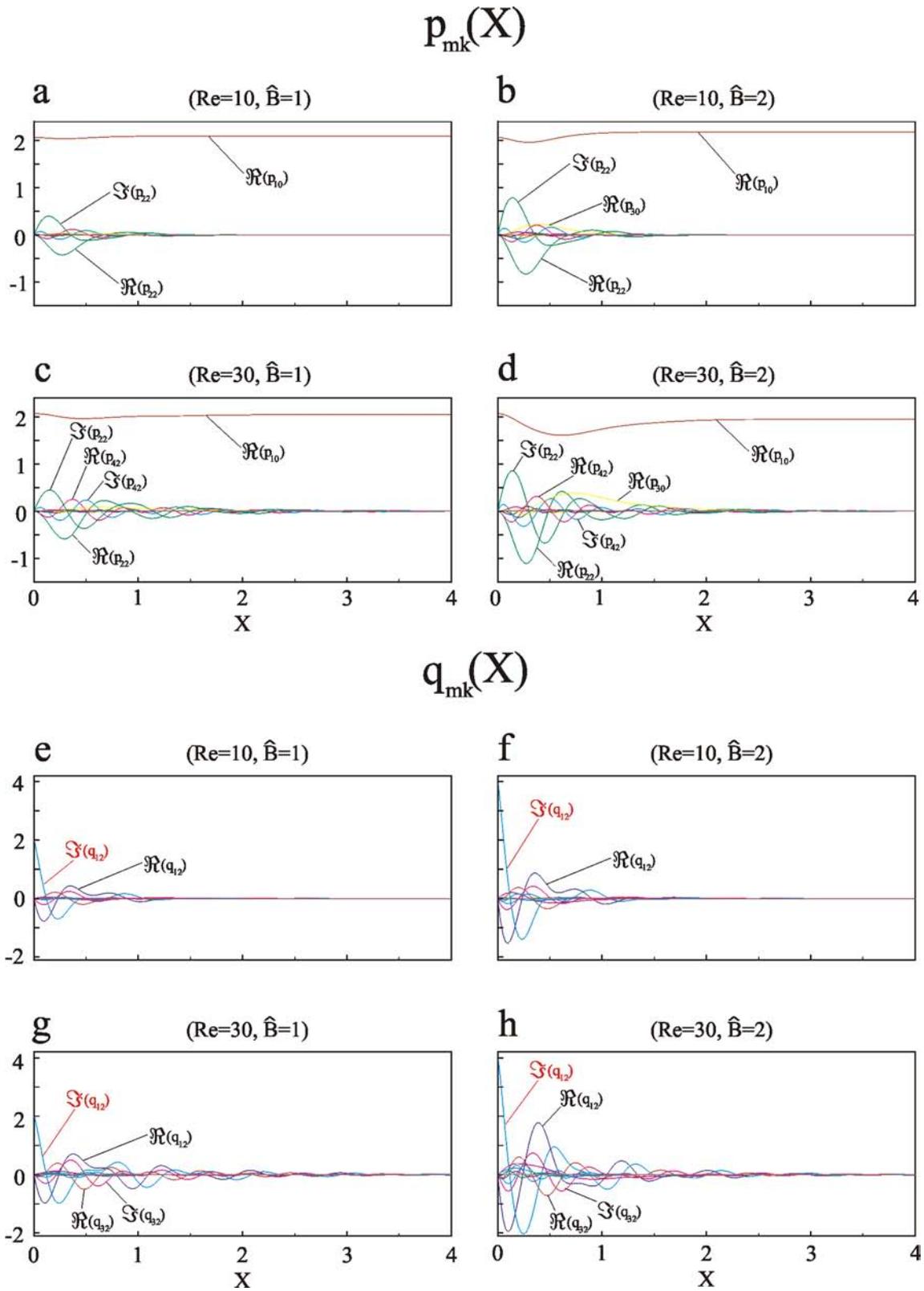


Abbildung 4.3: Koeffizientenverläufe für die Parameterkombinationen $(Re = 10, \hat{B} = 1)$, $(Re = 10, \hat{B} = 2)$, $(Re = 30, \hat{B} = 1)$, $(Re = 30, \hat{B} = 2)$.

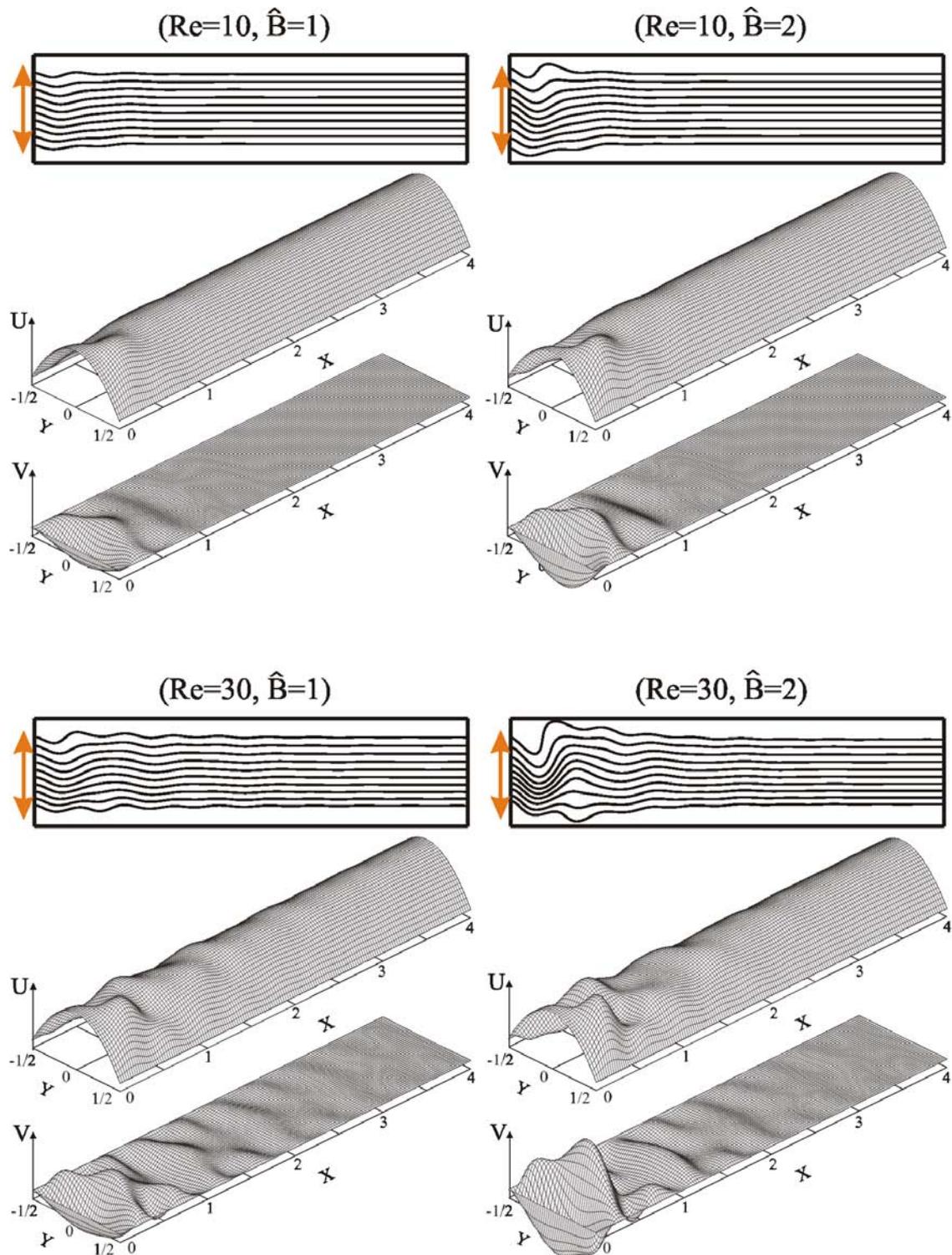


Abbildung 4.4: Rekonstruierte, instantane Geschwindigkeitsfelder $\mathbf{V}(T_0, X, Y)$ zum beliebig gewählten Zeitpunkt T_0 für die Parameterkombinationen $(Re = 10, \hat{B} = 1)$, $(Re = 10, \hat{B} = 2)$, $(Re = 30, \hat{B} = 1)$, $(Re = 30, \hat{B} = 2)$: Stromlinien und Geschwindigkeitskomponenten U, V .

Kapitel 5

Numerische Simulationen

5.1 Numerisches Verfahren

Trotz der Beschränkung auf zweidimensionale Probleme sind auch diese geometrisch oftmals schon so komplex, daß zur Untersuchung realistischer Geometrien manche Näherungsverfahren wie niedrigdimensionale Modelle (Kapitel 4) nicht verwendet werden können. Stattdessen müssen die Grundgleichungen mit Hilfe von Methoden gelöst werden, welche die zu untersuchenden Strukturen in ihrer geometrischen Komplexität verarbeiten können. Hierzu bieten sich Verfahren wie Finite-Differenzen-, Finite-Volumen- oder Finite-Elemente-Methoden an. In der vorliegenden Arbeit kommt das kommerzielle Finite-Elemente-Programm FIDAP zum Einsatz. Bei der Ortsdiskretisierung der Grundgleichungen werden vierseitige Elemente mit linearen Ansatzfunktionen für die Geschwindigkeiten verwendet, während der Druck innerhalb eines Elementes als konstant angenommen ist. Als Zeitschrittverfahren wird eine Prädiktor-Korrektor-Methode zweiter Ordnung verwendet. Die Strömungsgleichungen werden simultan, also voll gekoppelt, gelöst, da diese Methode laut FIDAP-Manual [15] für die meisten 2D-Probleme effizienter ist als die Entkopplung der Gleichungen für die gesuchten Größen und die anschließende iterative Lösung, beispielsweise mit einem SIMPLE- oder einem verwandten Verfahren. Für die Simulation der zweidimensionalen Strömung zweier inkompressibler, Newtonscher Flüssigkeiten werden die Materialgrößen der beiden Flüssigkeiten, d.h. die Dichten ρ , die dynamischen Viskositäten μ und die Dielektrizitätskonstanten ε_r , als identisch angenommen.

Allgemein ist das (ebene) elektrische Potentialfeld zwischen zwei Elektroden in Anwesenheit verschiedener Stoffe durch eine Lösung des Gauß-Gesetzes

$$\nabla(\varepsilon \nabla \varphi) = q \quad , \quad (5.1)$$

in Verbindung mit sinnvollen Randbedingungen zu erhalten. Auf Elektroden ist etwa das Potential fest vorgegeben, an den Rändern des Rechengebietes sind geeignete Randbedingungen zweiter oder dritter Art zu formulieren. Aufgrund der Anordnung verschiedener Stoffe innerhalb des Rechengebietes mit unterschiedlichen Dielektrizitätskonstanten ist zum einen $\varepsilon(x, y)$ zu beachten. Zum anderen ist ein Quellterm $q(x, y)$ überall dort präsent, wo verschiedene Stoffe (verschiedene ε) aneinandergrenzen. Das lokale elektrische Feld $E(x, y)$ ist über

$$E = -\nabla \varphi \quad (5.2)$$

mit dem Potentialfeld $\varphi(x, y)$ verknüpft.

Im Rahmen der hier vorgestellten Behandlung der EDL wird die Auswirkung des Quellterms an den Stoffgrenzen durch die wandnormale Verteilung der Ladungsdichte, Gleichung (2.17), approximiert. Es verbleibt demnach Gleichung (5.1) für $q = 0$

zu lösen (liefert das externe elektrische Feld), und das wandnahe Feld zu überlagern. Wenn zwischen den Elektroden zwei Stoffe (Flüssigkeit l , Wandmaterial s) ähnlicher Dielektrizitätskonstante angeordnet sind, d.h. für $\varepsilon_l \simeq \varepsilon_s$, entfällt weitergehend die Abhängigkeit $\varepsilon(x, y)$, und die Lösung wird weiter vereinfacht. Das externe elektrische Feld zwischen zwei Linienelektroden wird in diesem Fall konstant. Da in der vorliegenden Arbeit die prinzipielle Funktionsweise und die kontinuumsmechanische Behandlung elektrisch erregter Mikromischer-Strömungen aufgezeigt werden soll, erscheint es im Sinne einer ersten Näherung ausreichend, das elektrische Feld als räumlich konstant anzunehmen. Diese Näherung ist zulässig, solange die Dielektrizitätskonstanten von Flüssigkeit und Wand nicht zu verschieden sind.

5.2 Verifikation

Alle numerischen Verfahren sind Methoden zur näherungsweise Lösung mathematischer Problemstellungen. Sie kommen dann zum Einsatz, wenn für das gegebene Problem keine analytische Lösung gefunden werden kann. Diese Näherungslösungen sind fehlerbehaftet und unterscheiden sich deshalb von der eigentlich gesuchten, exakten Lösung. Anstelle einer analytischen, kontinuierlichen Lösung liefern sie eine diskrete Näherung derselben, berechnet an einer endlichen Anzahl von Stützstellen. Rundungs-, Abbruch- und Diskretisierungsfehler verfälschen die Näherung; es ist daher von Bedeutung zu wissen, inwieweit die Näherungslösung von der echten Lösung abweicht. Dabei ist zu beachten, daß auch ein sorgfältiges Austesten und Verifizieren der verwendeten numerischen Methoden keine endgültige Gewißheit bezüglich der Genauigkeit der Näherung bieten kann, denn das Anwenden von zuvor getesteten, numerischen Methoden auf das interessierende Problem bedeutet immer eine Extrapolation der in der Verifikationsphase gemachten Erfahrungen auf das neue Problem. Es ist aus diesem Grund darauf zu achten, daß Verifikationsfälle ausgewählt werden, welche ähnliche Anforderungen an die Numerik stellen wie das eigentlich zu lösende Problem. Für numerische Strömungsberechnungen bedeutet dies, daß eine Klassifizierung des Strömungstyps vorgenommen werden muß, nach Kriterien wie beispielsweise Über-/Unterschallströmung, (in)kompressibles Fluid, (nicht-)Newtonsches Fluid, (in)stationäre Strömung, ein-/zwei-/dreidimensionales Rechengebiet, Um-/Innenströmung, oder ob das zu lösende Problem Grenzschichtcharakter besitzt.

In der vorliegenden Arbeit sollen mit Hilfe des kommerziellen Finite-Elemente-Programms FIDAP inkompressible, instationäre Strömungen eines Newtonschen Fluids in zweidimensionalen Geometrien berechnet werden. In den meisten Berechnungen inkompressibler Strömungen kommt auf festen Wänden üblicherweise die herkömmliche Haftbedingung zum Einsatz; in der vorliegenden Arbeit hingegen tritt für die Bulk-Strömung aus der asymptotischen Anpassung eine unübliche Randbedingung auf, nämlich die Rutschbedingung (3.49, 3.50). Diese liefert eine endliche Geschwindigkeitskomponente tangential zur Wand, sofern lokal eine wandtangentiale Komponente des elektrischen Feldes vorliegt. Auf diese Weise wird der Einfluß externer elektrischer Felder auf die Strömung innerhalb der (im Rahmen

der Asymptotik unendlich dünn angenommenen) EDL in das Problem eingebracht, ohne diese mit einem sehr feinen Gitter auflösen zu müssen; so wird das elektrohydrodynamische Problem auf ein rein hydrodynamisches reduziert, siehe auch die Erläuterungen in Kapitel 3.5. Diese Rutschbedingung entspricht einer in ihrer eigenen Ebene mit der aus (3.49) berechneten Geschwindigkeit bewegten Wand, auf welcher die herkömmliche Haftbedingung gilt. Aus diesem Grund wird als Verifikationsbeispiel das Zweite Stokessche Problem der schwingenden Platte ausgewählt [44], wo man ebendiese Situation antrifft: In dieser Strömung tritt eine in ihrer eigenen Ebene schwingende Wand mit Haftbedingung auf, was den hier zu berechnenden Mikromischer-Strömungen mit der Rutschbedingung (3.49, 3.50) entspricht. Weiterhin existiert eine analytische Lösung für das Stokessche Problem, was einen optimalen Vergleich mit der von FIDAP errechneten, numerischen Näherungslösung ermöglicht. In Abbildung 5.1 ist das Problem skizziert. Eine unendlich ausgedehnte Platte schwingt periodisch in der Zeit in ihrer eigenen Ebene, was als Randbedingung gemäß

$$u(t, y = 0) = \hat{u} \sin(\omega_0 t) \quad (5.3)$$

in das Problem eingeht, mit \hat{u} als Amplitude und ω_0 als Frequenz der Plattenschwingung. Aufgrund der Haftbedingung (5.3) an der Platte wird das inkompressible Fluid in Schwingung versetzt; eine Welle wandert ausgehend von der Platte in das halbunendlich ausgedehnte Fluid hinein und wird dabei gedämpft. Für große Abstände von der Platte verschwindet die Amplitude der Bewegung, was als weitere Randbedingung

$$u(t, y \rightarrow \infty) = 0 \quad (5.4)$$

in die Definition des Problems eingeht. Die Navier-Stokes-Gleichungen können aufgrund der Annahme einer unendlich ausgedehnten Platte erheblich vereinfacht werden, und nach Auswertung der Kontinuitätsgleichung erhält man die das Problem beschreibende Differentialgleichung zu

$$u_t = \nu u_{yy} \quad , \quad (5.5)$$

wobei ν die kinematische Viskosität des Fluids bezeichnet. Die analytische Lösung des Problems lautet unter Einbeziehung der Randbedingungen (5.3, 5.4)

$$u(t, y) = \hat{u} \exp(-ky) \sin(\omega_0 t - ky) \quad , \quad (5.6)$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{\omega_0}{2\nu}} \quad . \quad (5.7)$$

Offensichtlich läuft eine gedämpfte Welle von der Platte weg in das Fluid hinein. Abbildung 5.2 zeigt in dimensionsloser Form das numerische Ergebnis für $u(t, y)$ aus FIDAP und die analytische Lösung (5.6) im eingeschwungenen Zustand zu vier verschiedenen Zeitpunkten während einer Schwingungsperiode; zusätzlich wird die Einhüllende, $\exp(-ky)$, aus der analytischen Lösung (5.6) gegeben. Die Geschwindigkeit u ist mit der Schwingungsamplitude der Platte, \hat{u} , entdimensioniert, und der Plattenabstand y mit der Länge k^{-1} . Nach einem kurzen Einschwingvorgang

gehen die Unterschiede zwischen der numerischen Lösung aus FIDAP und der analytischen Lösung (5.6) in der Strichstärke unter (maximaler relativer Fehler 0.2 ‰); der Einschwingvorgang in der numerischen Simulation kommt zustande, weil das Fluid als Anfangsbedingung für die numerische Berechnung als ruhend angenommen wird. Außerdem wird ersichtlich, daß die numerische Diffusion der Näherungsverfahren keine erkennbare künstliche Dämpfung der Schwingung, und damit keine nennenswerte künstliche Diffusion, in die numerische Lösung einbringt (maximale Zell-Reynolds-Zahl $Re_{c,max} = 0.023$).

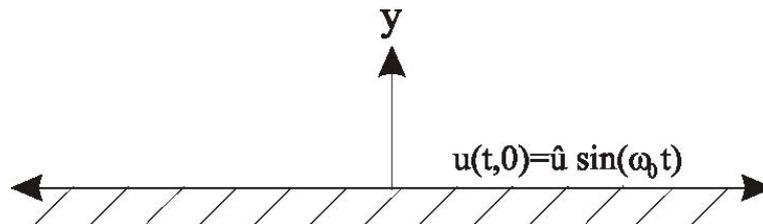


Abbildung 5.1: Stokessches Problem der schwingenden Platte.

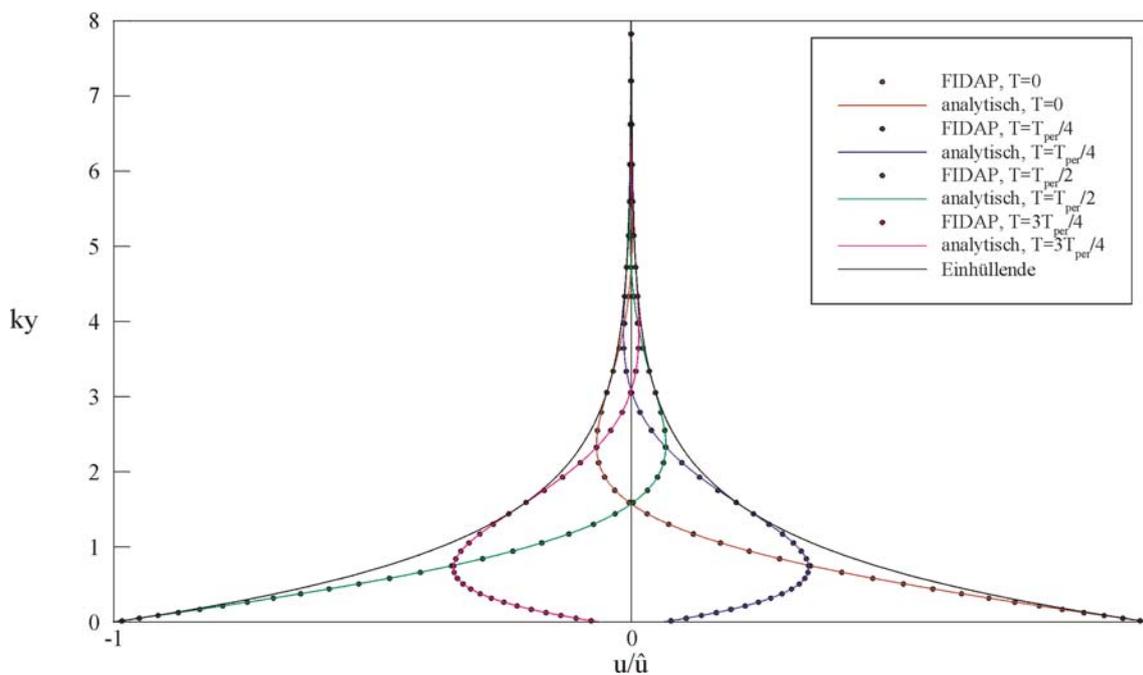


Abbildung 5.2: Vergleich der FIDAP-Lösung mit der analytischen Lösung zu vier verschiedenen Zeitpunkten während einer Schwingungsperiode T_{per} .

5.3 Erläuterung der Randbedingung

Den Einfluß der Anpassungsbedingungen (3.49, 3.50), welche in den numerischen Simulationen verwendet werden, verdeutlicht Abbildung 5.3. In Abbildung 5.3a ist die stationäre, symmetrische Umströmung eines zylindrischen Hindernisses von links

nach rechts ohne elektrische Kräfte anhand von Stromlinien und Geschwindigkeitsvektoren visualisiert; die Färbung der Geschwindigkeitsvektoren steht für den Geschwindigkeitsbetrag. Ohne elektrische Kräfte ergibt sich auf der Zylinderoberfläche aufgrund der Haftbedingung die Geschwindigkeit Null. In Abbildung 5.3b hingegen wirken nach oben gerichtete, elektrische Kräfte F_{el} auf das Fluid innerhalb der elektrischen Doppelschicht, welche den Zylinder umgibt; die Hauptströmung ist wie in Abbildung 5.3a von links nach rechts gerichtet. Gemäß (3.49) ergibt sich an jeder Stelle der Zylinderoberfläche in Abhängigkeit von der lokalen, wandtangentialen Komponente des elektrischen Feldes ein Wert für die wandtangentiale Geschwindigkeit; die wandnormale Geschwindigkeit ist laut (3.50) immer Null. Da das elektrische Feld gerade senkrecht nach oben gerichtet ist, wird die Geschwindigkeit auf der Zylinderoberfläche nach (3.49) dort maximal, wo die Wand gerade tangential zum elektrischen Feld verläuft, also am Äquator des Zylinders¹. An den Polen hingegen ist die Wand gerade senkrecht zum elektrischen Feld ausgerichtet, weshalb dort keine wandtangentiale Komponente des Feldes vorhanden ist und somit auch keine Rutschgeschwindigkeit gemäß (3.49). Der Staupunkt der Strömung wird durch den Einfluß der Randbedingung auf die Unterseite des Zylinders verschoben, während der Ablösepunkt auf die Oberseite wandert. Es entsteht eine lokal asymmetrische Umströmung des Hindernisses, hervorgerufen durch die asymmetrischen elektrischen Kräfte.

Wird ein zeitlich veränderliches Feld $F_{el}(T)$ angelegt, variieren auch die Anpassungsbedingungen in der Zeit; dies ist für den Fall eines periodisch veränderlichen, vertikalen elektrischen Feldes in Abbildung 5.3c dargestellt. Die Umströmung des zylindrischen Hindernisses ist zu zwei Zeitpunkten gezeigt. Zum Zeitpunkt T_1 weist das elektrische Feld gerade mit maximaler Amplitude nach oben, während es zum Zeitpunkt T_2 nach unten gerichtet ist. Die Umströmung des Hindernisses verläuft wiederum von links nach rechts und wird zu beiden Zeitpunkten durch einige Stromlinien visualisiert. Durch die alternierenden elektrischen Kräfte wird das Fluid abwechselnd nach oben ($T = T_1$) und nach unten ($T = T_2$) vom Zylinder weg in die Hauptströmung getrieben. Auf diese Weise läßt sich die Vermischung zweier Flüssigkeiten, welche ein Hindernis in einem Kanal unter- und oberhalb der Symmetrieachse umströmen, fördern; weitere Erläuterungen zu den Einzelheiten dieses Effektes folgen in Kapitel 7.

¹Obwohl für einen (zweidimensionalen) Kreis die Begriffe eines Pols und eines Äquators eigentlich nicht definiert sind, sollen diese Bezeichnungen hier in Analogie zu einer (dreidimensionalen) Kugel aufgrund ihrer Anschaulichkeit dennoch verwendet werden.

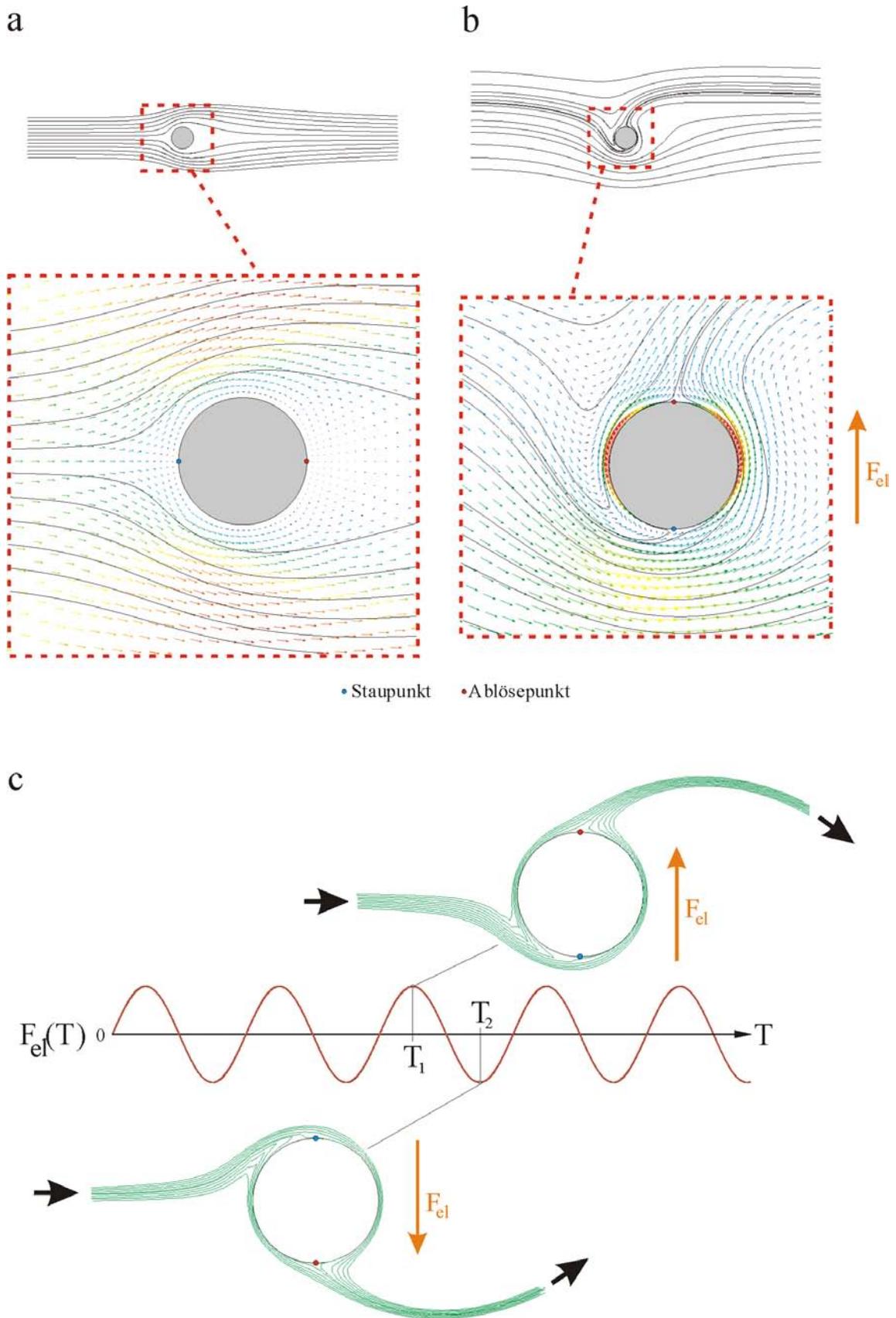


Abbildung 5.3: (a) Symmetrische (ohne elektrische Kräfte) und (b) asymmetrische (mit elektrischen Kräften) Umströmung eines Hindernisses; (c) periodische (mit elektrischen Kräften) Umströmung eines Hindernisses.

Kapitel 6

Vermischungsbewertung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, eine möglichst schnelle und vollständige Vermischung zweier Flüssigkeiten 1, 2 in einer Mikrokanalstruktur zu erreichen. Dazu sollen die Flüssigkeiten unter Einwirkung elektrischer Wechselfelder miteinander verrührt werden, um die dazwischenliegende Grenzfläche zu vergrößern. Die Stoffdiffusion auf molekularer Ebene kann dann über diese Grenzfläche effektiver ablaufen und zu einer vollständigen Vermischung der beiden Flüssigkeiten führen. Die Effizienz dieses Verfahrens hängt von mehreren Parametern ab, etwa von der gewählten Geometrie des Mikromischers, dem Strömungsfeld, der Stärke, Frequenz und räumlichen Ausrichtung des angelegten elektrischen Wechselfeldes, oder den Stoffeigenschaften von Flüssigkeiten und Wandmaterialien. Um eine gegebene Kombination dieser Parameter auf ihre Eignung zum effizienten Mischen hin zu beurteilen, muß ein Kriterium zur Bewertung der Vermischungsgüte gefunden werden. Es werden im Folgenden vier verschiedene Ansätze vorgestellt. Alle vier Methoden werden anhand der in Abbildung 6.1 dargestellten Mischer-Modellströmung hergeleitet und erläutert.

6.1 Berechnung der Konzentrationsverteilung

Der naheliegendste Ansatz ist, die beiden reinen Flüssigkeiten durch die Konzentrationen $c_1 = 0$ und $c_2 = 1$ darzustellen und die Konzentrationsverteilung $c_1 \leq c(x, y) \leq c_2$ in der Mikrokanalstruktur infolge der zugrundeliegenden Strömung zu berechnen. Hierzu werden für N Spezies $N - 1$ Stofftransportgleichungen der (dimensionslosen) Form

$$\partial_t C_k + \mathbf{U} \nabla C_k = Pe_k^{-1} \Delta C_k \quad (6.1)$$

numerisch gelöst, wobei

$$Pe_k = \frac{u_0 l_0}{D_k} \quad (6.2)$$

die Peclet-Zahl der k -ten Spezies bedeutet, welche konvektiven und diffusiven Stofftransport ins Verhältnis setzt. Da hier die Stoffdiffusivität für alle beteiligten Spezies als gleich angenommen wird, $D_k = D$, gilt vereinfachend eine universelle Peclet-Zahl $Pe = Pe_k$, welche für alle Stoffe gleich ist. Als Randbedingungen bieten sich in den hier interessierenden Fällen Dirichlet-Randbedingungen am Einlaß an, während auf den Wänden und am Auslaß der Normalgradient zu Null gesetzt wird. Die Lösung einer Stofftransportgleichung erlaubt es somit, sowohl den konvektiven als auch den diffusiven Transport zu berücksichtigen. Als Ergebnis erhält man etwa am Mischer-auslaß ein Konzentrationsprofil, welches direkt Aussagen über die Gemischqualität erlaubt, siehe Abbildung 6.1a. Ziel ist es, am Auslaß eine möglichst homogene Konzentration $c = 0.5$ zu erreichen. Der Konzentrationsberechnung aus Abbildung 6.1a

zugrunde gelegt ist eine am Einlaß quer zur Hauptströmungsrichtung oszillierende Kanalströmung, wie sie auch in Kapitel 4.2 beschrieben ist. Weitere Einzelheiten der Strömung sollen an dieser Stelle nicht interessieren; es geht hier lediglich darum, die verschiedenen Ansätze zur Vermischungsbewertung zu erläutern und bei identischer Strömung zu vergleichen.

Bei der numerischen Lösung der zugehörigen Stofftransportgleichung treten allgemein Schwierigkeiten auf, die diesen Ansatz für viele Anwendungsfälle unpraktikabel werden lassen. Realistische Diffusivitäten D für Flüssigkeiten sind so klein, daß zur Berechnung sehr feine Gitter mit entsprechend hohem Rechenaufwand notwendig werden, um die Stabilität der numerischen Verfahren zu garantieren; dies kann durch die Zell-Peclet-Zahl,

$$Pe = \frac{u^* l^*}{D} \quad , \quad (6.3)$$

ausgedrückt werden, welche mittels einer für die Rechenzelle typischen Geschwindigkeit u^* und einer typischen Zellabmessung l^* das Verhältnis von Konvektion zu Diffusion beurteilt. Daß der Stofftransport in Flüssigkeitsströmungen oftmals konvektionsdominiert ist und die Stoffdiffusion nur eine sehr untergeordnete Rolle spielt, zeigt sich an der Schmidt-Zahl,

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad , \quad (6.4)$$

welche für Flüssigkeiten typischerweise Werte um 1000 annimmt. Da hier zeitabhängige Simulationen durchgeführt werden, begrenzt die geringe Gitterweite außerdem die Zeitschrittweite, wenn explizite Zeitschrittverfahren verwendet werden. Weiterhin kann unphysikalische numerische Diffusion, bedingt durch die verwendete räumliche Diskretisierung, in die gleiche Größenordnung wie die physikalische kommen; dies führt zu weiteren Fehlern.

6.2 Verfolgen der gesamten Grenzfläche

Wie in Kapitel 1.2 dargelegt, hängt die Effizienz eines Mischverfahrens entscheidend davon ab, wie stark die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten während des Mischprozesses vergrößert wird. Daher liegt es nahe, diese zu betrachten und ihre Vergrößerung während des Mischvorganges zu messen. Dazu werden Partikel (jeweils eines pro Zeitschritt der instationären Simulation) am Einlaß der Geometrie auf der Grenzfläche plaziert und dann stromab geschwemmt; die Verbindungslinie zwischen diesen Partikeln gibt ein Bild der Grenzfläche. Da sich die Grenzfläche mit fortschreitender Zeit stark verformen und vergrößern wird, werden sich benachbarte Partikel mit der Zeit voneinander entfernen. Um sicherzustellen, daß eine vernünftige Näherung der Grenzflächenposition und -form erhalten wird, werden zusätzliche Partikel dort eingefügt, wo der Abstand zweier benachbarter Partikel einen vorgegebenen Maximalwert überschreitet. Ebenso können Partikel, welche sich aufgrund der zugrundeliegenden Strömung zusammenballen und lokal eine unnötig hohe räumliche Auflösung der Grenzfläche liefern, entfernt werden; dadurch wird der Rechenaufwand in Grenzen gehalten. Abbildung 6.1b zeigt exemplarisch eine Momentaufnahme einer so verfolgten Grenzfläche (rot), und die Iso-Konzentrationslinie $c = 0.5$

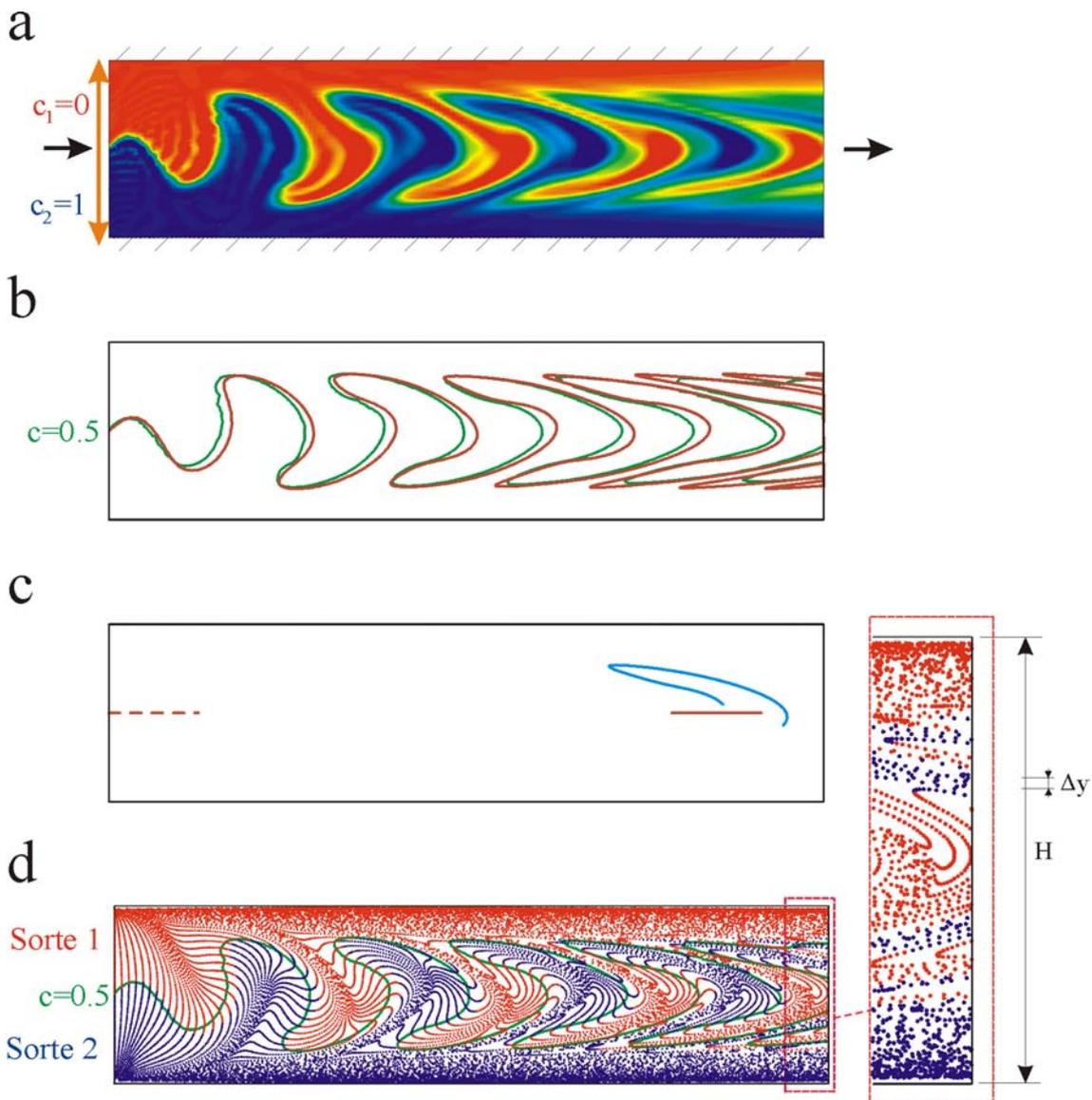


Abbildung 6.1: Methoden der Vermischungsbewertung: (a) numerisch berechnetes Konzentrationsfeld, (b) Verfolgen der gesamten Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten, (c) Verfolgen eines Teils der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten, (d) Markieren der beiden Flüssigkeiten durch Partikel.

(grün) aus dem Konzentrationsfeld aus Abbildung 6.1a ist zum Vergleich ebenfalls eingetragen. Die Länge einer solchen Linie (Grenzfläche) kann mit der Länge einer Referenzlinie verglichen werden. Ein mögliches Maß für die Vermischungsgüte stellt z.B. der Vergleich der Linienlängen bei an- bzw. ausgeschalteter Anregung dar, l_{an}/l_{aus} . Der Fall der ausgeschalteten Anregung dient hierbei als Referenz, und die Mischleistung bei angeschalteter Anregung soll möglichst optimal werden, d.h. l_{an}/l_{aus} soll einen möglichst großen Wert annehmen. Abbildung 6.2a demonstriert das Potential dieser Methode. Die zugrundeliegende Strömung entspricht der aus Abbildung 6.1, jedoch bei viermal größerer Amplitude der Quergeschwindigkeit und doppelter mittlerer Strömungsgeschwindigkeit. Dadurch ergibt sich eine wesentlich

komplexere Strömung, und in der Folge wird die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten deutlich stärker gelängt und aufgefaltet als dies in Abbildung 6.1 der Fall ist. Zusätzlich belegt Abbildung 6.3, daß die Grenzflächenlänge mit fortschreitender Zeit T in etwa exponentiell anwächst.

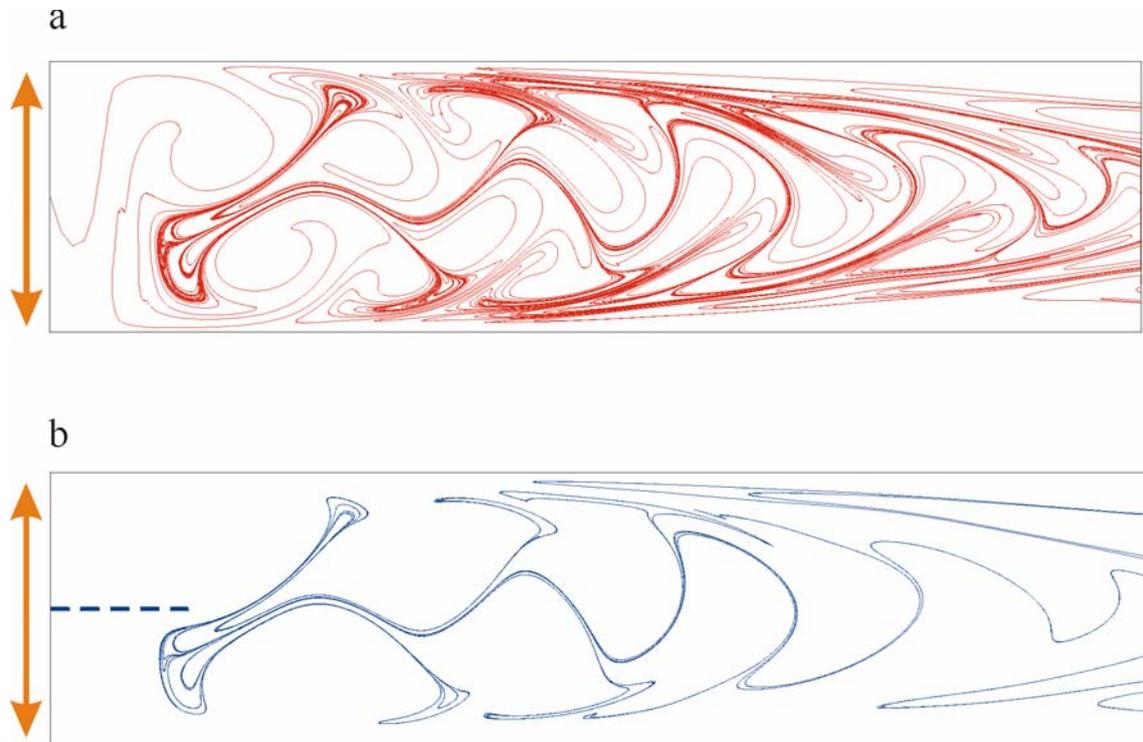


Abbildung 6.2: Verfolgen der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten: (a) Verfolgen der gesamten Grenzfläche, (b) Verfolgen eines Teils der Grenzfläche.

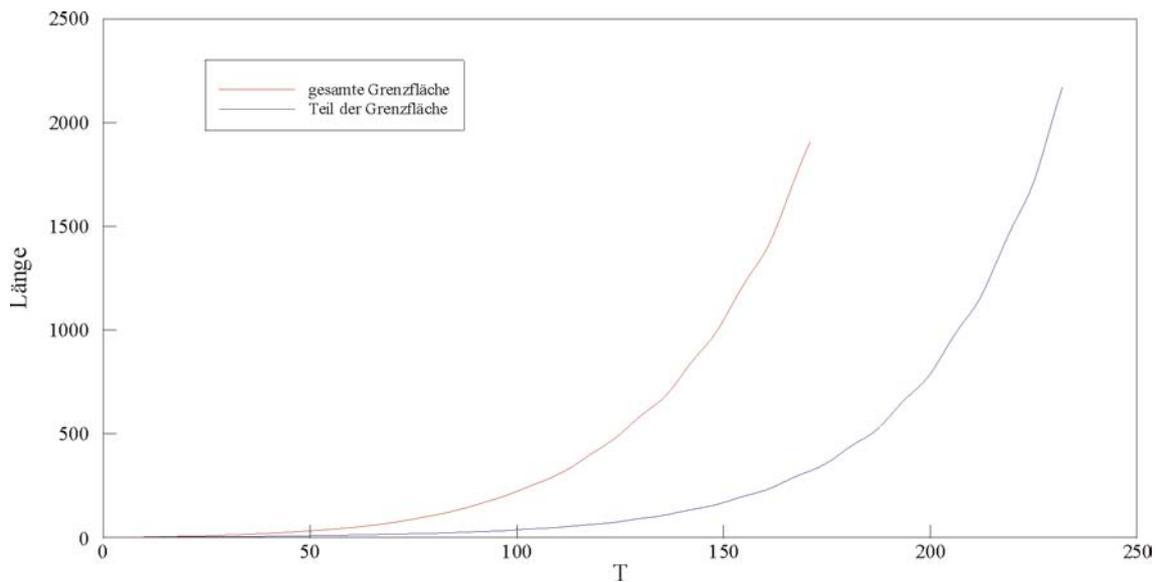


Abbildung 6.3: Entwicklung der Grenzflächenlänge mit fortschreitender Zeit T .

6.3 Verfolgen eines Teils der Grenzfläche

Da hier die Strömung durch einen Mischer mit Ein- und Auslaß behandelt wird, verläßt die Grenzfläche den betrachteten Strömungsbereich nach und nach wieder. Daher kann es von Vorteil sein, die Vermischungsbewertung anhand der Grenzfläche in dem Zeitraum vorzunehmen, innerhalb dessen ein definiertes Teilstück der Grenzfläche den Strömungskanal durchwandert; diese Vorgehensweise demonstriert Abbildung 6.1c. Hier kommen dieselben Methoden (Einfügen zusätzlicher Partikel, Entfernen überflüssiger Partikel) zum Einsatz wie in Kapitel 6.2, um eine genaue Verfolgung der Grenzfläche zu gewährleisten. Gestrichelt dargestellt ist ein Teil der Grenzfläche der Länge l_0 zum Anfangszeitpunkt, welcher mit der Zeit durch die Strömung gelängt, verformt (aufgefaltet) und stromab geschwemmt wird. Bei abgeschalteter Anregung würde diese Linie unverändert stromab transportiert werden, während die Strömung bei angeschalteter Anregung die Linie verändert. Die blaue durchgezogene Linie (Länge l_T) nahe des Auslasses zeigt Position und Form dieses Teils der Grenzfläche zu einem späteren Zeitpunkt T bei eingeschalteter Anregung, wohingegen die rote durchgezogene Linie denselben Teil der Grenzfläche bei abgeschalteter Anregung zum selben Zeitpunkt T darstellt (Länge l_0). Das Verhältnis beider Längen, l_T/l_0 , kann als Maß für die Vermischungsgüte dienen. Die Abbildungen 6.2b und 6.3 demonstrieren auch für diese Methode, daß ein genaues Verfolgen der schnell anwachsenden Grenzfläche mit hoher räumlicher Auflösung möglich ist.

6.4 Bestimmung des Konzentrationsfeldes mittels Partikelverfolgung

Um das Konzentrationsfeld im gesamten Simulationsgebiet zu erhalten und gleichzeitig die Probleme bei der Berechnung der Konzentration mit Hilfe der Stofftransportgleichung zu umgehen, kann alternativ eine Partikelnäherung verwendet werden. Während bei der numerischen Lösung der Stofftransportgleichung durch künstliche Diffusion der diffusive Austausch überbewertet wird, verspricht der Transport von Partikeln (nahezu) diffusionsfrei zu bleiben. Die Methoden in Kapitel 6.1 und Kapitel 6.4 grenzen demnach das wahre Konzentrationsfeld bei kleiner definierter Diffusivität ein. Anstatt die beiden Flüssigkeiten am Mischereinlaß mit den Konzentrationen $c_1 = 0$ bzw. $c_2 = 1$ zu belegen, werden zur Markierung masselose, schlupffrei der Strömung folgende und diese nicht beeinflussende Tracer-Partikel verwendet; außerdem besteht keine Interaktion zwischen den Partikeln. Die Partikel werden zeitlich kontinuierlich und gleichmäßig über den Einlaßrand verteilt in die Strömung eingebracht. Entsprechend ihrer jeweiligen Anfangsposition innerhalb der Flüssigkeiten 1 oder 2 werden sie der einen oder der anderen Flüssigkeit zugeschlagen; diese Zugehörigkeit behalten sie wegen der Schlupffreiheit während der gesamten Simulation bei. Die Partikel werden von der Strömung durch den Kanal transportiert, bis sie diesen schließlich durch den Auslaß verlassen, siehe Abbildung 6.1d. Dort wo sich ein Partikel der Sorte 1 befindet, liegt Flüssigkeit 1 vor; entsprechendes gilt für Partikel der Sorte 2 und Flüssigkeit 2. Je dichter die Partikelbesetzung

der Strömung ist, umso feiner wird die Verteilung der beiden Flüssigkeiten räumlich aufgelöst. In Abbildung 6.1d sind die Partikel zu einem bestimmten Zeitpunkt im Kanal farblich markiert gezeigt, und zusätzlich ist die Iso-Konzentrationslinie $c = 0.5$ (grün) zum selben Zeitpunkt aus dem Konzentrationsfeld aus Abbildung 6.1a überlagert. Offensichtlich kommt diese Iso-Konzentrationslinie in guter Näherung auf die Grenze zwischen roten und blauen Partikeln zu liegen. Abweichungen der Iso-Konzentrationslinie von der Grenzlinie zwischen roten und blauen Partikeln entstehen nur durch unterschiedlich starke Diffusion bei der Berechnung des Konzentrationsfeldes und bei der Berechnung der Partikelverteilung; das zugrundegelegte Geschwindigkeitsfeld, und damit der konvektive Transport, ist in beiden Fällen gleich. In den Bewegungsgleichungen für die Partikel,

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{V}(\mathbf{x}, t) \quad , \quad (6.5)$$

tritt keine physikalische Diffusion auf; das zur Partikelverfolgung verwendete Integrationsverfahren wird dennoch zu geringer (numerischer) Diffusion führen. Die Gleichungen (6.5) werden deshalb mit einem Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung integriert. Methoden niedrigerer Ordnung wie beispielsweise die Euler-Vorwärts-Integration liefern zu ungenaue Ergebnisse, und Verfahren höherer Ordnung bringen kaum Genauigkeitsgewinn, verursachen aber einen deutlichen Mehraufwand bei der Berechnung.

Zur Vermischungsbewertung mittels der hier geschilderten Partikelmethode wird nun als allein ausschlaggebend angesehen, von welcher Qualität das Gemisch ist, das den Mikromischer nach Durchlaufen der Mischstrecke verläßt; in welchem Zustand die beiden Flüssigkeiten innerhalb des Mixers sind, sei von untergeordneter Bedeutung. Daher wird bei dieser Methode nur der Auslaß des Mixers betrachtet, um mit Hilfe der Partikelverteilung über die Gemischqualität zu befinden. Dazu wird der Ausströmrand der Höhe H in D Bilanzzellen der Breite $\Delta y = H/D$ unterteilt, siehe vergrößerter Ausschnitt in Abbildung 6.1d. Innerhalb jeder dieser Bilanzzellen werden alle austretenden Partikel (n_r rote, n_b blaue) gezählt. Daraus läßt sich für die i -te Bilanzzelle eine mittlere Konzentration, etwa für Flüssigkeit 1, gemäß $c_{i,r} = n_r / (n_r + n_b)$ berechnen. Die Bilanzierung der austretenden Partikel erfolgt für die Dauer mindestens einer Zeitschrittweite Δt der Simulation, oder je nach Bedarf über einen größeren Zeitraum hinweg, was jeweils einer zeitlichen Mittelung gleichkommt. Auf diese Weise erhält man aus der Bilanzierung der austretenden Partikel eine Näherung für das instantane oder zeitlich gemittelte Konzentrationsprofil am Auslaß.

Anhand von Abbildung 6.4 sollen die wesentlichen Einflüsse auf die Güte der so erhaltenen Konzentrationsprofile erläutert werden. Hier ist jeweils das aus der Partikelverteilung ermittelte Konzentrationsprofil (blau) am Mischerauslaß zusammen mit dem Konzentrationsprofil (rot) aus der numerischen Lösung der Stofftransportgleichung gezeigt; beiden Profilen liegt die Strömung aus Abbildung 6.1 zugrunde. Die Anzahl der Bilanzzellen ist zu $D = 64$ bzw. $D = 256$ gewählt, und die über den Mischerauslaß austretenden Partikel werden über 20 bzw. 100 Zeitschritte hinweg bilanziert ($\Delta t_B = 20\Delta t$ bzw. $\Delta t_B = 100\Delta t$), weshalb auch das aus der Stofftransportgleichung erhaltene Konzentrationsprofil jeweils über denselben Zeitraum gemittelt

wird. Je größer D gewählt wird, umso feiner wird das Konzentrationsprofil räumlich aufgelöst; gleichzeitig wird das Profil jedoch stärker verrauscht, da die Anzahl der bilanzierten Partikel pro Bilanzzelle sinkt und deshalb zu statistisch unsichereren Mittelwerten führt. Diese Beobachtung wird aus dem Vergleich der Abbildungen 6.4a und 6.4b bzw. der Abbildungen 6.4c und 6.4d deutlich. Weiterhin ist zu erkennen, daß für einen längeren Bilanzierungszeitraum Δt_B das Rauschen im Profil zwar schwächer wird, dies jedoch um den Preis einer längeren Zeitmittelung; diese Aussage kann aus dem Vergleich der Abbildungen 6.4a und 6.4c bzw. der Abbildungen 6.4b und 6.4d abgeleitet werden. Abhilfe kann hier eine dichtere Partikelbeladung der Strömung schaffen, was allerdings auch einen erhöhten Rechenaufwand aufgrund der größeren Partikelanzahl mit sich bringt.

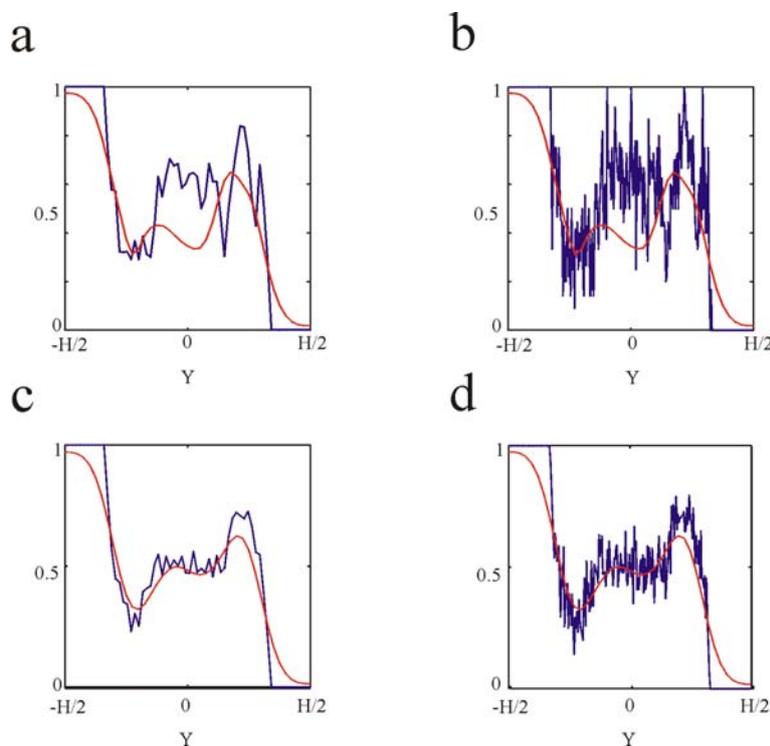


Abbildung 6.4: Einfluß der Anzahl D der Bilanzzellen und des Mittelungszeitraums Δt_B auf die Güte des Konzentrationsprofils am Mischerauslaß: (a) $D = 64$, $\Delta t_B = 20\Delta t$, (b) $D = 256$, $\Delta t_B = 20\Delta t$, (c) $D = 64$, $\Delta t_B = 100\Delta t$, (d) $D = 256$, $\Delta t_B = 100\Delta t$.

Für ingenieurmäßige Anwendungen ist es von Vorteil, wenn die Bewertung der Gemischqualität anhand einer einzigen, charakteristischen Größe vorgenommen werden kann. Hierzu bietet es sich an, das aus der Partikelverfolgung erhaltene Auslaß-Konzentrationsprofil zunächst mit den beiden Grenzfällen (i) perfekter Vermischung und (ii) denkbar schlechter Vermischung zu vergleichen und so eine Einordnung der erhaltenen Gemischqualität vorzunehmen. Unter (i) perfekter Vermischung ist zu verstehen, daß am Mischerauslaß an jeder Stelle und zu jedem Zeitpunkt die Konzentration $c = 0.5$ vorliegt. (ii) Die schlechteste Vermischung ist dadurch gekennzeichnet, daß die beiden Flüssigkeiten sich überhaupt nicht miteinander vermischen

haben. In Abbildung 6.5a sind die beiden Grenzfälle schematisch dargestellt. Gezeigt sind die Konzentrationsprofile über den Mischerauslaß der Höhe H für perfekte (rot, Index „id“) und denkbar schlechte (grün, Index „wc“) Vermischung; die aus der Partikelsimulation erhaltene Mischer-Auslaßkonzentration wird zwischen diesen beiden Extrema liegen.

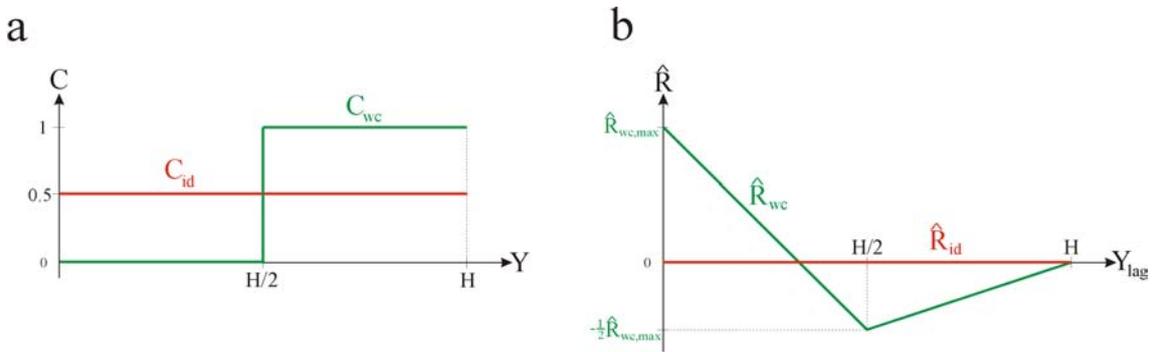


Abbildung 6.5: Grenzfälle der Gemischqualität: (a) Mischerauslaß-Konzentrationen, (b) Autokorrelationsfunktionen der beiden Grenzfälle.

Zunächst erscheint es naheliegend, die Abweichung des ermittelten Konzentrationsprofils vom Idealfall zu quantifizieren; diese Vorgehensweise wird jedoch insbesondere bei großer Anzahl D der Bilanzzellen und bei kleinerem Bilanzzeitraum Δt_B durch den hohen Rauschanteil im Konzentrationsprofil erschwert. Aus diesen Gründen ist es sinnvoll, zunächst die Autokorrelation \hat{R} der Konzentrationsprofile zu berechnen, um statistische Rauschanteile zu entfernen. In Abbildung 6.6 sind zum einen die Konzentrationsprofile aus der Lösung der Stofftransportgleichung und zum anderen Konzentrationsprofile aus der Partikelverfolgung für verschiedene D , Δt_B gegeben (erste Spalte). Die daraus berechneten Autokorrelationen (dritte Spalte) weichen für einen Parametersatz nur wenig voneinander ab, lediglich die Autokorrelation der Konzentration aus der Stofftransportgleichung (rote Kurve) ist aufgrund stärkerer Diffusion glatter. Der Vergleich der Ortsfrequenzspektren (zweite und vierte Spalte) zeigt weiter, daß die wesentlichen Anteile erhalten bleiben und um Rauschanteile bereinigt sind.

Damit bietet es sich an, anstelle der Konzentrationsprofile die Autokorrelation zur Ableitung einer charakteristischen Größe für die Gemischqualität zu verwenden. Zwar erlaubt die Autokorrelation nicht die Rekonstruktion des Konzentrationsprofils, jedoch beinhaltet sie (bereinigt um statistisches Rauschen) die wesentlichen statistischen Eigenschaften des Konzentrationsprofils. In Abbildung 6.5b sind die Autokorrelationen \hat{R}_{id} und \hat{R}_{wc} für die Grenzfälle perfekter (rot) und schlechtestmöglicher (grün) Vermischung gezeigt. Offensichtlich gilt für die Autokorrelation bei idealer Vermischung

$$\hat{R}_{id} = 0 \quad . \quad (6.6)$$

Die Autokorrelation einer endlichen, diskreten Wertefolge x_k , $0 \leq k \leq D - 1$, wobei

D die Anzahl der Werte bedeutet, läßt sich schreiben als

$$\hat{R}_k = \sum_{n=1}^{D-k} x_{n+k} x_n \quad , \quad 0 \leq k \leq D-1 \quad . \quad (6.7)$$

Für den Fall schlechtestmöglicher Vermischung läßt sich die Wertefolge $x_{wc,k}$ als

$$x_{wc,k} = \begin{cases} -\frac{1}{2} & , \quad 0 \leq k \leq \frac{D}{2} \\ \frac{1}{2} & , \quad \frac{D}{2} + 1 \leq k \leq D-1 \end{cases} \quad , \quad (6.8)$$

angeben. Hierzu ist die Wertefolge aus Abbildung 6.5a (grün) um den Mittelwert $\bar{x} = 0.5$ bereinigt. Man findet mit den Definitionen (6.7) und (6.8) für die Autokorrelation im Fall schlechtestmöglicher Vermischung \hat{R}_{wc} nach kurzer Rechnung

$$\hat{R}_{wc} = \begin{cases} \frac{D-3k}{4} & , \quad 0 \leq k \leq \frac{D}{2} \\ \frac{k-D}{4} & , \quad \frac{D}{2} + 1 \leq k \leq D-1 \end{cases} \quad . \quad (6.9)$$

Die Abweichung vom Idealfall läßt sich mittels der Definition der Standardabweichung s geeignet darstellen. Mit den Gleichungen (6.6, 6.9) erhält man die Standardabweichung vom Idealfall bei schlechtestmöglicher Vermischung zu

$$\begin{aligned} s_{wc} &= \sqrt{\frac{1}{D-1} \sum_{k=0}^{D-1} (\hat{R}_{wc,k} - \hat{R}_{id,k})^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{D-1} \left[\sum_{k=0}^{D/2} \left(\frac{D-3k}{4} \right)^2 + \sum_{k=D/2+1}^{D-1} \left(\frac{k-D}{4} \right)^2 \right]} \quad (6.10) \\ &= \sqrt{\frac{\frac{D^3}{96} + \frac{D^2}{32} + \frac{5D}{96}}{D-1}} \quad . \end{aligned}$$

Für die Abweichung eines zu bewertenden Konzentrationsprofils vom Idealfall kommt analog

$$s = \sqrt{\frac{1}{D-1} \sum_{k=0}^{D-1} (\hat{R}_k - \hat{R}_{id,k})^2} = \sqrt{\frac{1}{D-1} \sum_{k=0}^{D-1} (\hat{R}_k)^2} \quad . \quad (6.11)$$

Hierin stellt \hat{R}_k die Autokorrelation des zu bewertenden Konzentrationsprofils dar. Die Vermischungsgüte Q kann nun mit $s_{id} = 0$ etwa gemäß

$$Q = \frac{s_{wc} - s}{s_{wc} - s_{id}} = 1 - \frac{s}{s_{wc}} \quad (6.12)$$

definiert werden. Hier wird die Abweichung des zu bewertenden Konzentrationsprofils vom Idealfall auf die Abweichung bei schlechtestmöglicher Vermischung bezogen. Für perfekte Vermischung wird $s = s_{id} = 0$ und Q somit zu Eins, während man für schlechtestmögliche Vermischung $s = s_{wc}$ bzw. $Q = 0$ findet; in allen anderen Fällen

nimmt Q einen Wert zwischen Null und Eins an. Je größer der Wert von Q , desto besser sind die Flüssigkeiten vermischt.

Abbildung 6.7 zeigt die Autokorrelationen \hat{R} (blau), für dieselben vier Parameterkombinationen ($D = 64, 256$ und $\Delta t_B = 20\Delta t, 100\Delta t$) wie in Abbildung 6.4 und Abbildung 6.6, im Vergleich zu den Autokorrelationen \hat{R}_{id} für ideale (rot) und \hat{R}_{wc} für schlechtestmögliche (grün) Vermischung. Wie zu erwarten, liegt die Autokorrelation \hat{R} betragsmäßig zwischen den beiden Grenzfällen \hat{R}_{id} und \hat{R}_{wc} . Ebenfalls gezeigt sind die nach Definition (6.12) bestimmten Werte Q für die Vermischungsgüte. Zuerst wird deutlich, daß die Werte aus der Partikelverfolgung nur sehr schwach von der Anzahl der Bilanzzellen D und der Länge des Bilanzzeitraums abhängen; dies wird offensichtlich durch die Verwendung der Autokorrelation erreicht. Die Abweichungen der vier Werte voneinander liegen bei weniger als 8.5 ‰. Die Abweichungen der Werte für Q aus den Partikelverfolgungen von den Werten für Q aus der Stofftransportgleichung sind jedoch deutlich größer; die Werte für Q aus der Stofftransportgleichung werden aufgrund der stärkeren Diffusion um bis zu 9.5% größer.

Abbildung 6.8 demonstriert, daß die Vermischungsgüte Q auch für komplexe Strömungen zuverlässige Ergebnisse liefert. Hier ist ein zylindrisches Hindernis in einem geraden Strömungskanal angeordnet. Mittels eines von außen angelegten elektrischen Wechselfeldes, welches stets senkrecht zur Hauptströmungsrichtung gerichtet bleibt, wird eine oszillierende Umströmung des Hindernisses realisiert, siehe die ausführliche Erläuterung dieses Problems in Kapitel 7.2. Durch die elektrische Anregung bilden sich am Hindernis Wirbelstrukturen, welche mit der Kanalströmung stromab transportiert werden. Diese Wirbel bewirken ein starkes Verrühren der beiden Flüssigkeiten, was die Diffusion auf molekularer Längenskala begünstigt, da die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten vergrößert wird. Um die Konzentration auf Basis der Partikelverfolgung mit der Konzentration aus der Stofftransportgleichung vergleichen zu können, wird für die Strömung das (zeitabhängige) Konzentrationsfeld berechnet. Dies geschieht für eine Schmidt-Zahl von $Sc = 10$, was eine unphysikalisch große Stoffdiffusion impliziert; dies wird aus dem Konzentrationsfeld im oberen Teil von Abbildung 6.8 deutlich, wo die beiden anfänglich getrennten Flüssigkeiten (rot, blau) innerhalb kurzer Lauflänge zum großen Teil bereits recht gut vermischt sind (grün). Die Wahl $Sc = 10$ ist erfolgt, um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten. Wäßrige Lösungen haben typischerweise Schmidt-Zahlen von $Sc \sim 10^3$, was von in der Realität deutlich kleineren Diffusivitäten herrührt, als es der hier getroffenen Wahl von $Sc = 10$ entspricht. Die Bewertung der Vermischungsgüte geschieht an der mit der Linie $A - A$ markierten Position, weil dort noch deutliche Gradienten im Konzentrationsfeld vorhanden sind. In Abbildung 6.8 sind wiederum die Konzentrationsprofile, deren Autokorrelationen sowie die Vermischungsgüte Q aus der Lösung der Stofftransportgleichung und aus der Partikelverfolgung für $D = 64$ und $D = 256$ gegenübergestellt, sowohl für einen Bilanzzeitraum von $\Delta t_B = 20\Delta t$ als auch für $\Delta t_B = 100\Delta t$. Die Periodendauer der elektrischen Anregung ist $T_{per} = 100\Delta t$. Wie zu erkennen ist, weist die Partikelverteilung dieselbe Struktur wie das Konzentrationsfeld auf. Der Partikelverteilung ist zusätzlich die Iso-Konzentrationslinie $c = 0.5$ aus der Stofftransportgleichung überlagert, und wie zu erwarten treffen rote und blaue Partikel gerade entlang dieser Linie aufeinander. Anhand der Werte für Q

wird deutlich, daß für jeden Mittelungszeitraum Δt_B die Werte aus der Partikelverfolgung nur sehr schwach von der Anzahl D der Bilanzzellen abhängen. Der Wert Q aus der Lösung der Stofftransportgleichung ist jeweils deutlich höher, bedingt durch die starke Stoffdiffusion. Die Werte Q , welche sich für größere Mittelungszeiträume Δt_B ergeben, sind konsistenterweise größer als für kleine Mittelungszeiträume. Dies macht deutlich, daß die Vermischungsgüte Q in instationären Konzentrationsfeldern empfindlich vom Mittelungszeitraum abhängt, ein physikalisch sinnvolles Ergebnis.

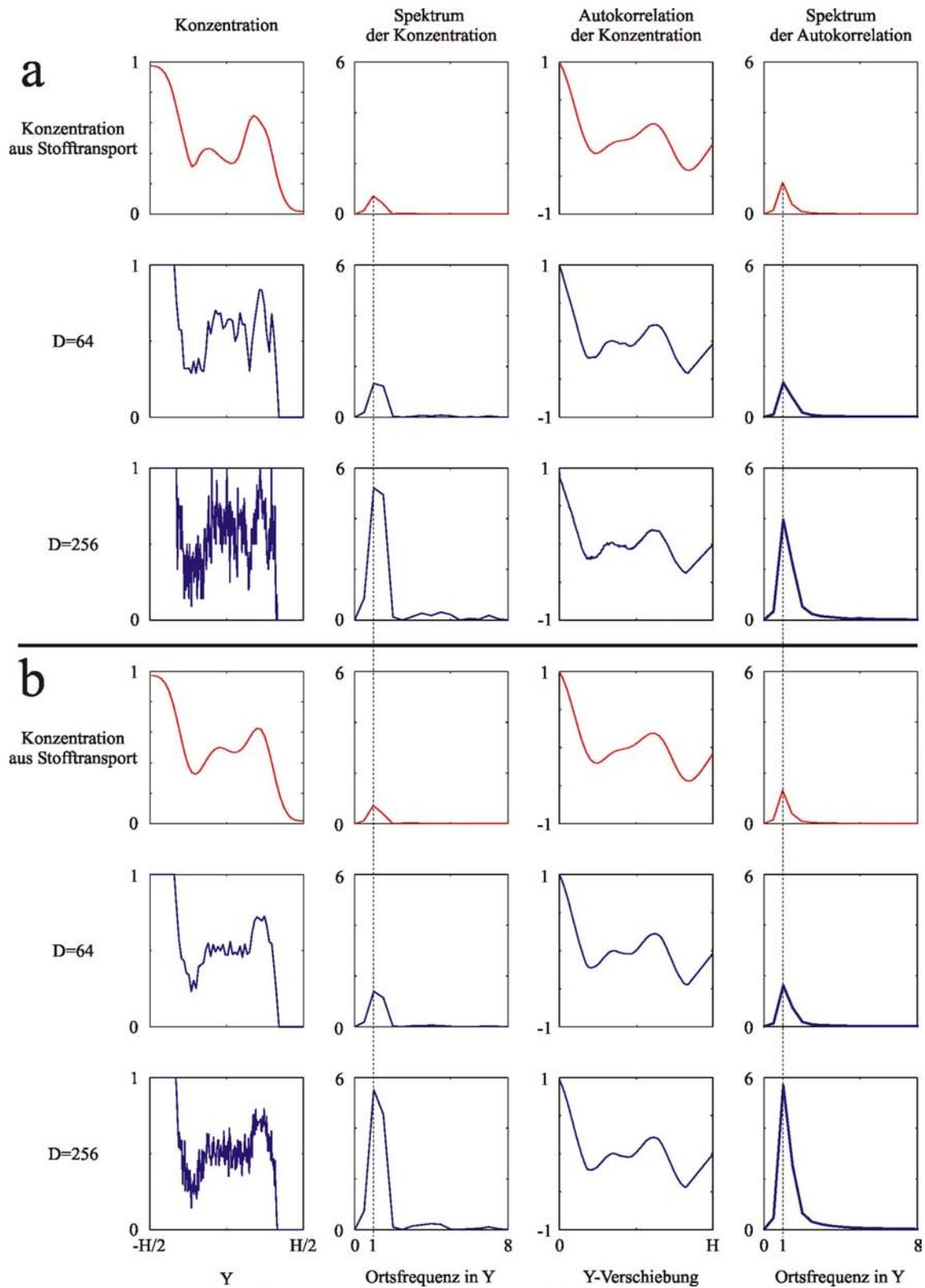


Abbildung 6.6: Konzentrationen, Autokorrelationen und Spektren: (a) $\Delta t_B = 20\Delta t$, (b) $\Delta t_B = 100\Delta t$.

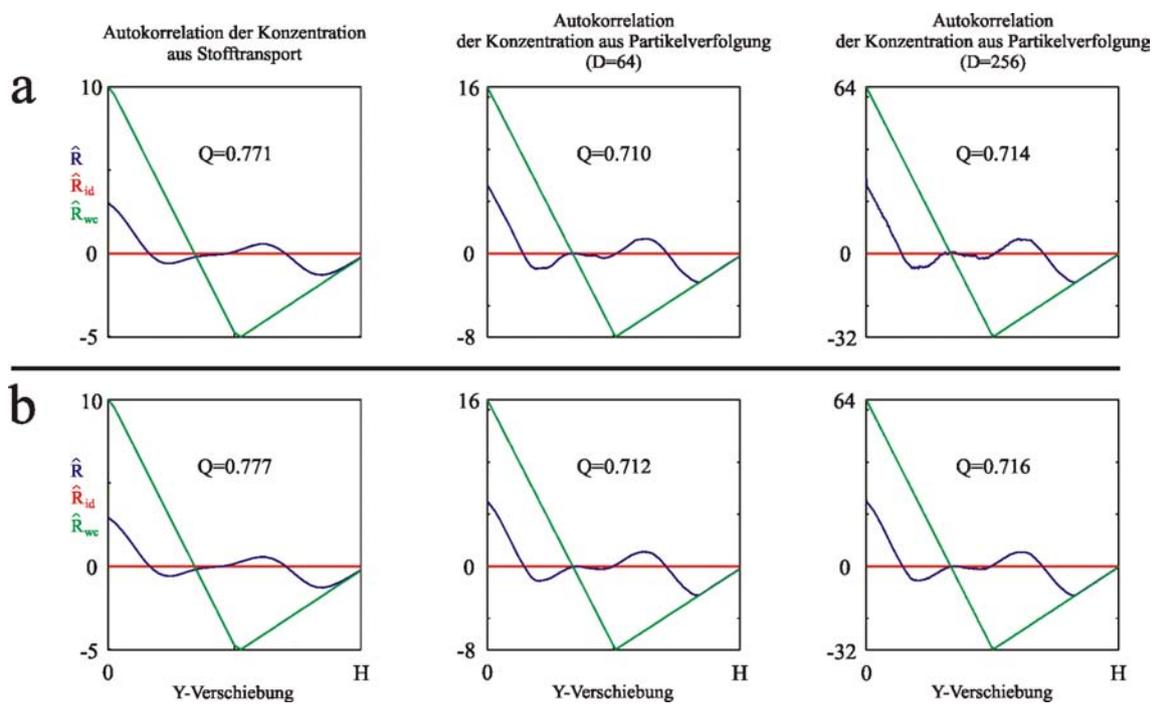


Abbildung 6.7: Autokorrelationen und Q -Werte nach (6.12) der Konzentrationsprofile aus der Stofftransportgleichung und aus der Partikelverfolgung für $D = 64$ und $D = 256$: (a) $\Delta t_B = 20\Delta t$, (b) $\Delta t_B = 100\Delta t$.

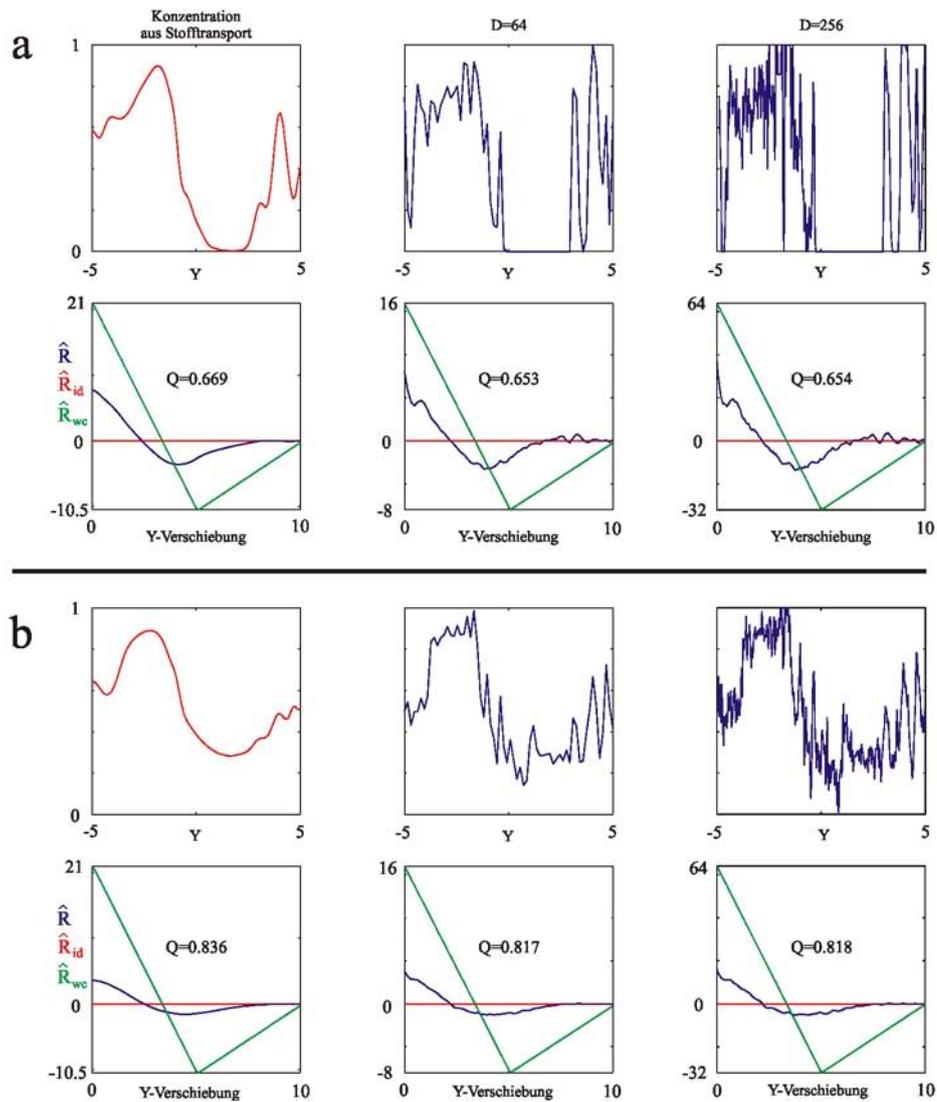
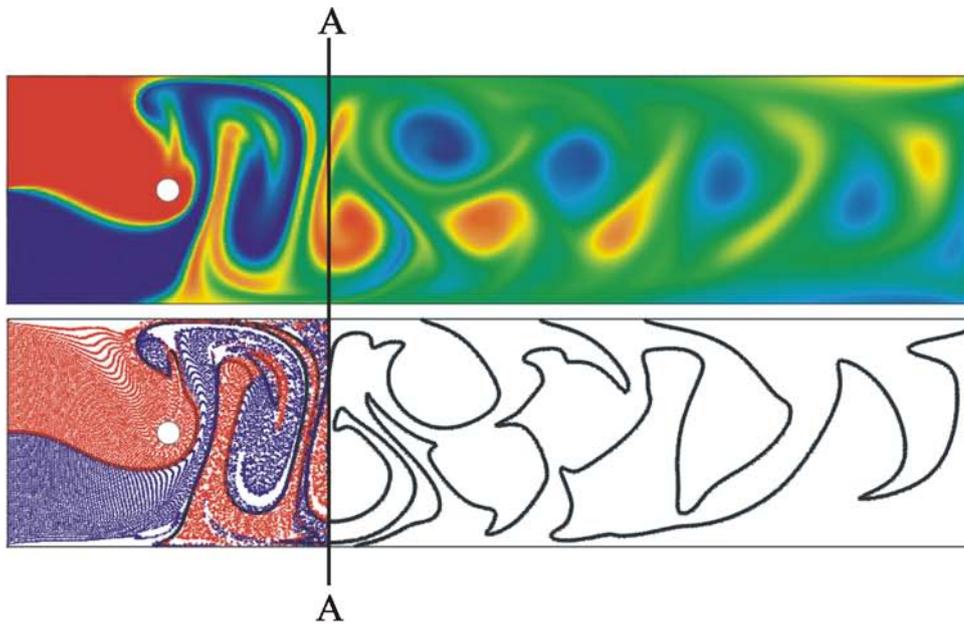


Abbildung 6.8: Konzentrationen, Autokorrelationen und Q -Werte nach (6.12) der Konzentrationsprofile aus der Stofftransportgleichung und aus der Partikelverfolgung für $D = 64$ und $D = 256$ an der Position $A - A$: (a) $\Delta t_B = 20\Delta t$, (b) $\Delta t_B = 100\Delta t$.

Kapitel 7

Ergebnisse

Die Streckung und Auffaltung der Grenzfläche zwischen den zu mischenden Flüssigkeiten ist entscheidend für die Effizienz eines Mischverfahrens. In makroskopischen Strömungen wird dies üblicherweise durch mechanisches Rühren oder durch Turbulenz erreicht. In Mikroströmungen sind mechanische, bewegte Komponenten jedoch kaum realisierbar, und die Reynolds-Zahl ist in Mikroströmungen so klein, daß Turbulenz als Mittel zur Vermischung entfällt. Die hier vorgestellte Methode zur Vermischung beruht auf der Erzeugung einer zeitabhängigen Sekundärströmung, um eine Streckung und Auffaltung der Grenzfläche zu erreichen. Hierzu wird die Tatsache ausgenutzt, daß von außen eingebrachte, elektrische Kräfte die Mikroströmung innerhalb der EDL beeinflussen können. Mit Hilfe dieser elektrischen Kräfte werden Teile der zu mischenden Flüssigkeiten quer zur Hauptströmungsrichtung bewegt, so daß sie in die Hauptströmung getrieben werden und dort eine Verwirbelung verursachen.

In der vorliegenden Arbeit werden zwei Kanalgeometrien auf ihre Eignung zum Vermischen von Flüssigkeiten hin untersucht, siehe Abbildung 7.1. Im Folgenden sollen beide Varianten bezüglich ihres Potentials zum Vermischen von Flüssigkeiten charakterisiert werden. Die in Kapitel 6 vorgestellten Methoden zur Vermischungsbewertung werden hierzu auf beide Fälle angewendet.

7.1 Untersuchte Mischergeometrien

Die Simulationen gehen von einem generischen Mischmodell aus, siehe Abbildung 1.1. Zwei zu mischende Flüssigkeiten werden, aus zwei getrennten Kanälen kommend, in einem gemeinsamen Mischkanal zusammengeführt. In diesem vollzieht sich der eigentliche Vermischungsvorgang, und das Gemisch wird aus dem gemeinsamen Mischkanal abgeführt. Die Simulationsrechnungen beschränken sich auf den in Abbildung 1.1 gekennzeichneten Bereich, um den Rechenaufwand so klein wie möglich zu halten.

Es werden zwei verschiedene Maßnahmen vorgeschlagen, um die Vermischung der beiden Flüssigkeiten zu fördern. Wie in Abbildung 7.1a gezeigt, wird im einen Fall eine gerade Kanalstruktur betrachtet, wobei auf der Mittelachse ein zylindrisches Hindernis des Durchmessers D angeordnet ist. Wird von außen ein elektrisches Wechselfeld $\mathbf{E}(t)$ senkrecht zur Kanal-Längsachse angelegt, wirken innerhalb der EDLs aller Wände, an denen eine wandtangente Komponente des elektrischen Feldes existiert (orange eingefärbt), wandtangente elektrische Kräfte; diese Kräfte beeinflussen die Strömung lokal an den Wänden, was zur Förderung der Vermischung ausgenutzt werden kann. Im zweiten Fall wird die aufgefaltete Kanalstruktur aus Abbildung 7.1b untersucht. Wird ein vertikal ausgerichtetes elektrisches Feld angelegt,

kann die Strömung an den orange markierten Wandteilen (wandtangente Komponente $E_{\bar{x}}$ des elektrischen Feldes ungleich Null) mit Hilfe der elektrischen Kräfte gezielt modifiziert werden, um die Vermischung der Flüssigkeiten zu begünstigen.

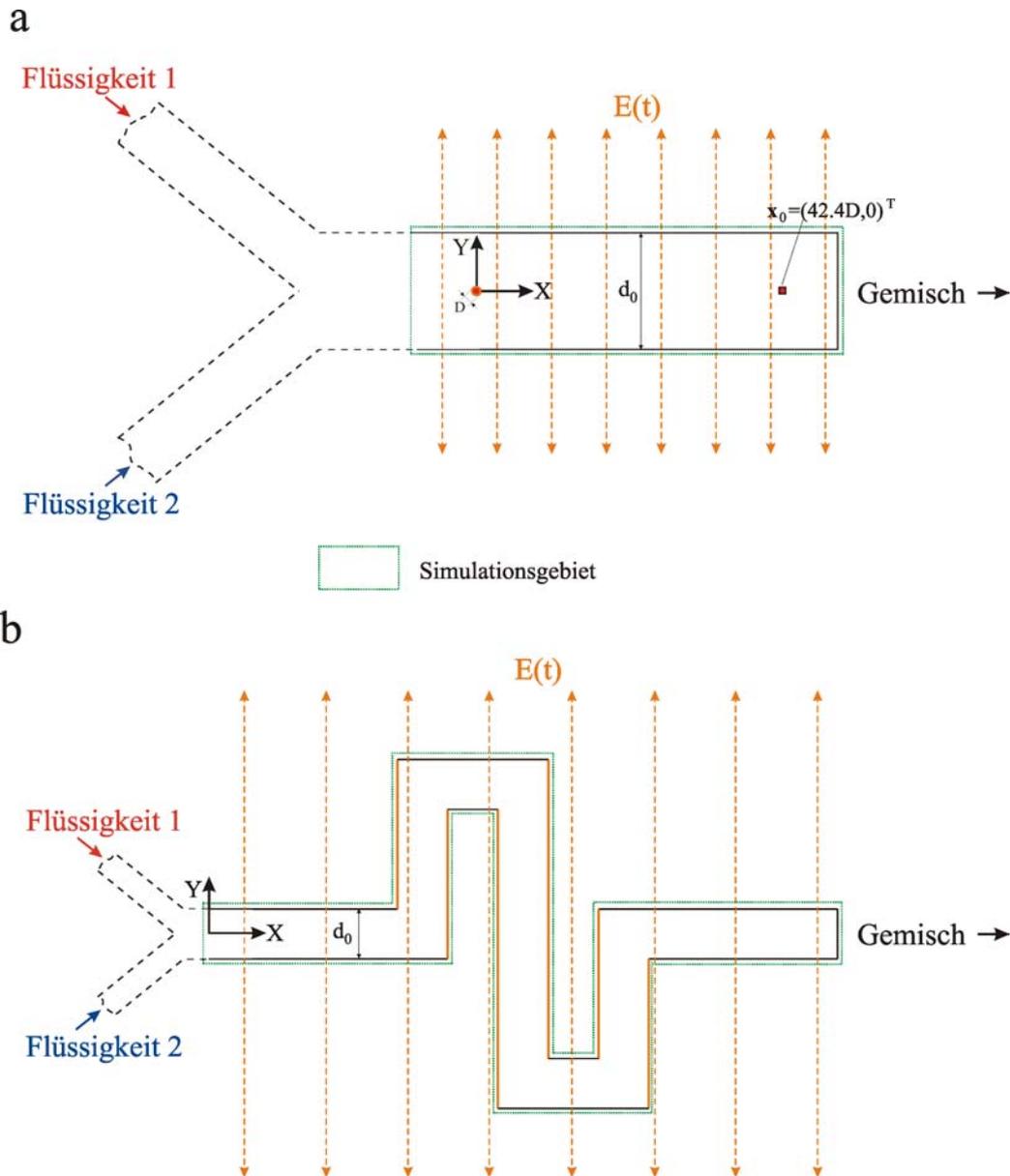


Abbildung 7.1: Für die Simulationen verwendete Geometrien.

Als Einlaßrandbedingung wird in beiden Geometrien jeweils ein Rechteckprofil mit

$$\begin{aligned} u &= u_0 \quad , \\ v &= 0 \end{aligned} \quad (7.1)$$

vorgegeben, während am Auslaß in beiden Fällen eine konvektive Ausströmrandbedingung gemäß

$$u_t + u_0 u_x = 0 \quad ,$$

$$v_t + u_0 v_x = 0 \quad (7.2)$$

verwendet wird [48]; diese erlaubt den störungsfreien Austritt von Störungen aus dem Rechengebiet. Auf den Wänden gelten die Anpassungsbedingungen (3.49, 3.50).

7.2 Mischkanal mit internem Hindernis

Die Simulationen für den in Abbildung 7.1a gezeigten geraden Kanal mit internem Hindernis werden für verschiedene Hindernis-Reynolds-Zahlen, Anregungsfrequenzen und -amplituden durchgeführt. Die Kanalweite d_0 beträgt 14 Hindernis-Durchmesser D ; der Einströmrand befindet sich sieben Durchmesser stromauf, und der Ausströmrand 50 Durchmesser stromab des Hindernisses. Abbildung 7.2a zeigt anhand von Stromlinien die stationäre Hindernis-Umströmung ohne Anregung, und im Vergleich dazu Abbildung 7.2b typische Stromlinien für eine Anregungsamplitude $(\Pi_x, \Pi_y)^T = (0, 15)^T$ (d.h. keine Feldkomponente in X -Richtung) und für eine dimensionslose Anregungsfrequenz $F = fd_0/u_0$ von $F = 1.4$ zu vier verschiedenen Zeitpunkten während einer Anregungsperiode T_0 . Die Hindernis-Reynolds-Zahl $Re_D = u_0 D/\nu$ beträgt $Re_D = 10$, gebildet mit der Geschwindigkeit u_0 aus der Einströmrandbedingung (7.1). Ausgehend vom Hindernis bilden sich periodische Wirbelstrukturen, welche stromab geschwemmt werden und die Grenzfläche zwischen den zu mischenden Flüssigkeiten vergrößern.

7.2.1 Einfluß der Anregungsfrequenz

Der Einfluß der Anregungsfrequenz wird an Abbildung 7.3 deutlich. Hier werden zum einen zwei Durchmesser stromauf des Hindernisses kontinuierlich Partikel (rot, blau) ober- bzw. unterhalb der Trennlinie zwischen beiden Flüssigkeiten in die Strömung eingebracht, so daß die virtuelle Grenzfläche gerade zwischen den verschiedenfarbigen Partikelströmen liegt. Mit Hilfe der in Kapitel 6.4 beschriebenen Partikelverfolgung werden die Teilchen mit der Strömung durch die Geometrie geschwemmt, und die Abbildungen 7.3A-E zeigen Momentaufnahmen der Partikelverteilungen für die Anregungsfrequenzen $F = 0, 2.33, 1.4, 0.93, 0.7$, so daß ein Eindruck von der Geometrie der virtuellen Grenzfläche gewonnen werden kann. Abbildung 7.3A gibt zum Vergleich die Situation ohne elektrische Anregung wieder. Ohne elektrische Anregung und bei einer Hindernis-Reynolds-Zahl von $Re_D = 10$, stellt sich eine stationäre, zur Kanal-Mittelachse symmetrische Umströmung ein; Vermischung auf molekularer Längenskala kann nur entlang der kurzen Grenzfläche zwischen den beiden Flüssigkeiten stattfinden. Wird die Strömung hingegen durch elektrische Kräfte in der oben erläuterten Weise periodisch angeregt, bildet sich in allen Fällen eine periodische Strömung aus. Für eine hohe Anregungsfrequenz von $F = 2.33$, Abbildung 7.3B, vergrößert sich die Grenzfläche zwischen den beiden Flüssigkeiten nur geringfügig, was an der schwach welligen Linie deutlich wird, an der rote und blaue Partikel aneinandergrenzen. Weiterhin ist die Querbewegung der Grenzfläche gering, weshalb große Bereiche an den Wänden keine Vermischung erfahren. Für kleinere Anregungsfrequenzen $F = 1.4, 0.93, 0.7$ wie in den Abbildungen 7.3C,D,E wird die

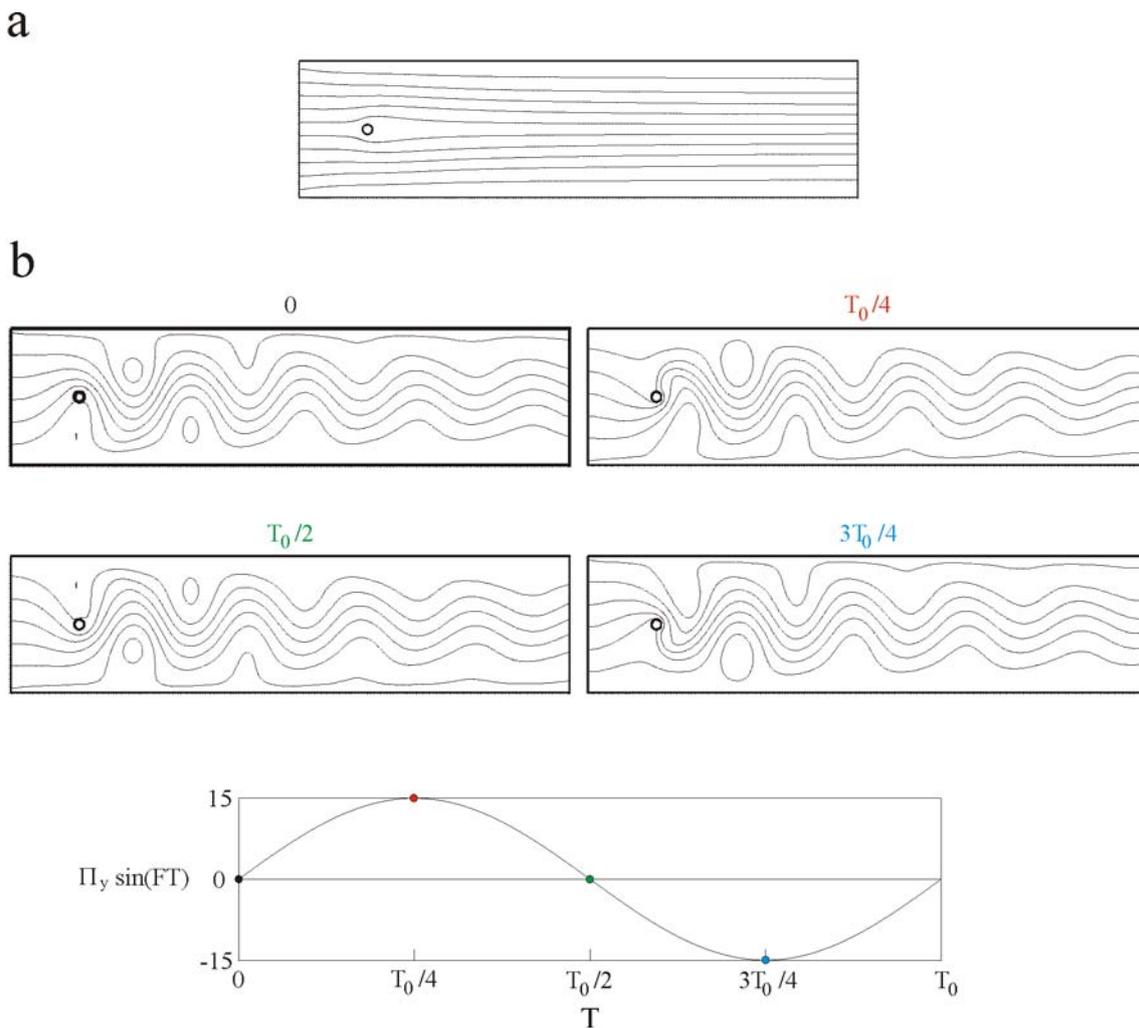


Abbildung 7.2: Stromlinien der Hindernis-Umströmung im geraden Kanal (a) ohne Anregung (stationäre Strömung) und (b) mit elektrischer Anregung für die Anregungsfrequenz $F = 1.4$ und die Anregungsamplitude $\Pi_y = 15$, zu den vier Zeitpunkten $T = (0, T_0/4, T_0/2, 3T_0/4)$ innerhalb einer Anregungsperiode $T_0 = 1/F$.

Querbewegung der Grenzfläche größer, und Partikelballen der einen Farbe werden von andersfarbigen Partikeln eingeschlossen, was auf eine bessere Vermischung der beiden Flüssigkeiten hindeutet. Andererseits werden aufgrund der kleineren Anregungsfrequenz weniger Wirbelstrukturen pro Längeneinheit erzeugt. Hier deutet sich bereits an, daß eine optimale Frequenz existiert, die zur bestmöglichen Vermischung führt.

Zum anderen wird in den Abbildungen 7.3b-e eine Reihe von Partikeln gemäß der in Kapitel 6.3 vorgestellten Methode auf einem Teil der virtuellen Grenzfläche platziert (gestrichelte Linie) und dann stromab transportiert. Diese Reihe von Partikeln erfährt aufgrund der zugrundeliegenden Strömung eine Längung und Verformung, und die durchgezogenen Linien zeigen die Positionen dieser Partikel zum selben Zeitpunkt wie in den Abbildungen 7.3B-E für die Anregungsfrequenzen von

$F = 2.33, 1.4, 0.93, 0.7$. Hier ist auf die Darstellung für den Fall der Anregungsfrequenz $F = 0$ verzichtet.

Die Vergrößerung der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten kann quantifiziert werden, indem die Länge des Fadens $l_{\Delta T}$ nach einer bestimmten Zeit ΔT mit der Anfangslänge l_0 verglichen wird. Dieses Verhältnis $l_{\Delta T}/l_0$ ist demnach ein Maß für die Vergrößerung der Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten, siehe Kapitel 6.3. In den vier Fällen werden die Verhältnisse $l_{\Delta T}/l_0 = 4.52, 5.87, 5.70, 4.36$ gemessen. Dieses Ergebnis verdeutlicht, daß eine bezüglich der Vermischungseffizienz optimale Anregungsfrequenz existiert. Offensichtlich wird für ansonsten konstante Parameter die Grenzfläche zwischen den Flüssigkeiten maximal für eine Anregungsfrequenz zwischen $F = 2.33$ und $F = 0.93$.

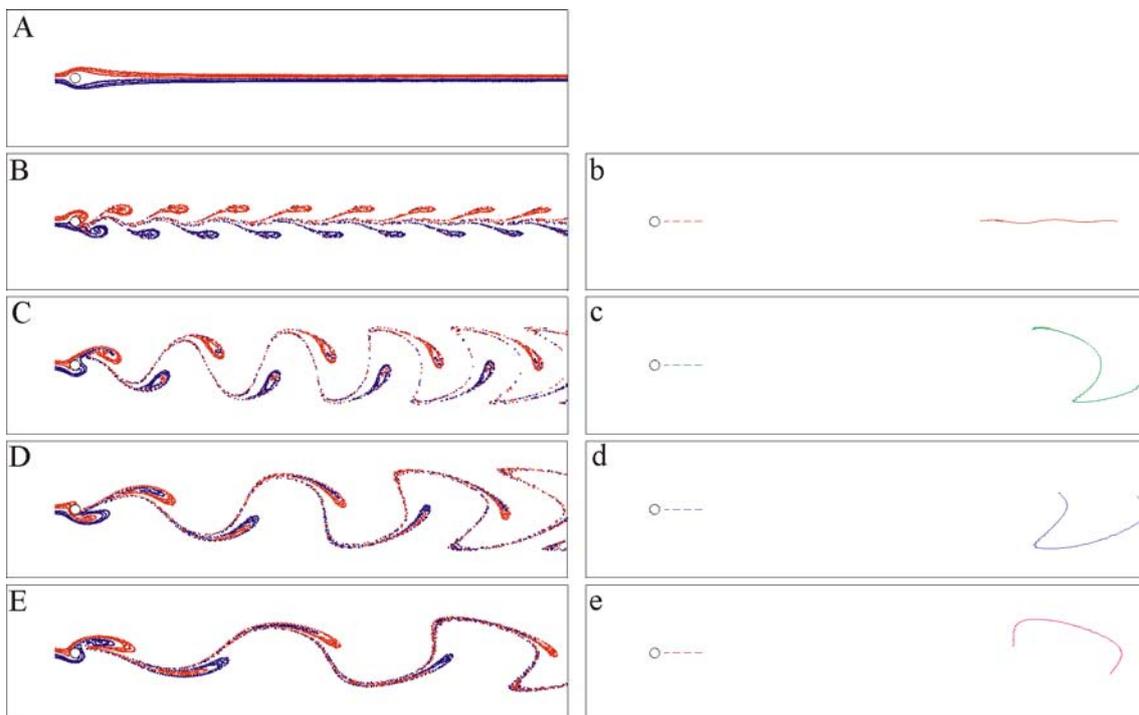


Abbildung 7.3: (A-E) Partikelverteilungen in der Hindernis-Umströmung im geraden Kanal für die Anregungsfrequenzen $F = 0, 2.33, 1.4, 0.93, 0.7$, (b-e) Positionen und Formen eines imaginären Fadens auf der Grenzfläche für die Anregungsfrequenzen $F = 2.33, 1.4, 0.93, 0.7$.

Dieses Ergebnis wird durch Abbildung 7.4 bestätigt, wo Momentaufnahmen der Grenzflächen nach der in Kapitel 6.2 beschriebenen Methode für dieselben Anregungsfrequenzen $F = 2.33, 1.4, 0.93, 0.7$ dargestellt sind. Zusätzlich sind die dimensionslosen Längen der Grenzflächen l/d_0 als Funktion der Zeit T gezeigt. Auch hier wird deutlich, daß zwischen den Anregungsfrequenzen $F = 2.33$ und $F = 0.93$ ein Maximum der Grenzflächenlänge zu erwarten ist, denn für $F = 1.4$ findet man stets den größten Wert l/d_0 (grüne Kurve). Bis zum Zeitpunkt $T = T_H$ wächst l/d_0 in allen vier Fällen gleich an, während sie von links in das Rechengebiet hineingeschwemmt wird; dann wird das Hindernis erreicht, und von da an ($T > T_H$) beeinflußt die periodische Umströmung des Hindernisses die Verformung und Längung

der Grenzfläche unterschiedlich stark, je nach Anregungsfrequenz. Das Anwachsen von l/d_0 und damit das Anwachsen der Grenzfläche erfolgt in allen Fällen exponentiell; wegen der hier gewählten halblogarithmischen Auftragung erscheint dieses exponentielle Anwachsen linear.

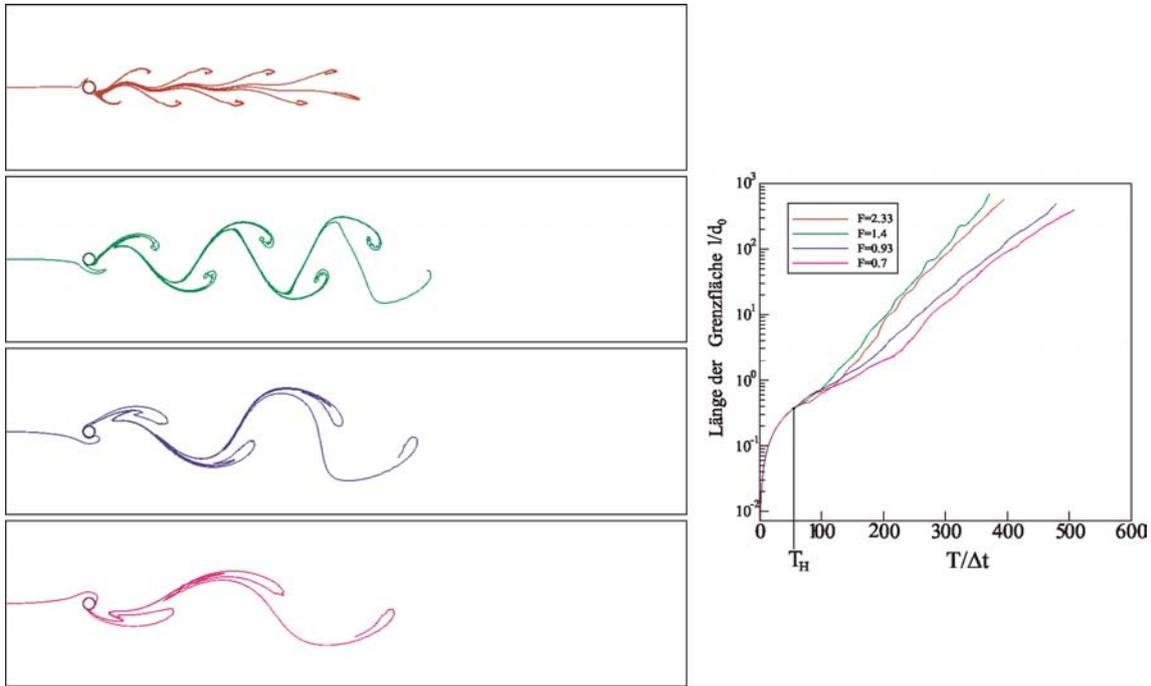


Abbildung 7.4: Positionen und Formen der Grenzflächen für die Anregungsfrequenzen $F = 2.33, 1.4, 0.93, 0.7$, und Entwicklung ihrer Längen mit der Zeit T .

7.2.2 Einfluß der Anregungsamplitude

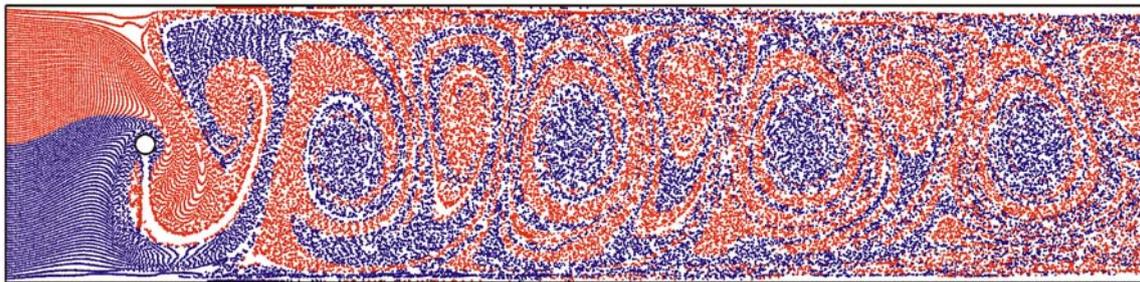
Um die Auswirkungen verschiedener Anregungsamplituden auf die Vermischung zu untersuchen, werden hier zwei Fälle miteinander verglichen. Die Hindernis-Reynoldszahl beträgt $Re_D = 1$, die Anregungsfrequenz $F = 1.4$, und die Anregungsamplituden sind $(\Pi_x, \Pi_y)^T = (0, 15)^T$ und $(\Pi_x, \Pi_y)^T = (0, 30)^T$. Abbildung 7.5 zeigt Momentaufnahmen der Partikelverteilung für diese beiden Fälle; hier ist bereits zu erkennen, daß eine höhere Anregungsamplitude eine stärkere Durchmischung der Flüssigkeiten zur Folge hat.

Zudem werden bei der größeren Anregungsamplitude irreguläre, nicht-periodische Geschwindigkeitsfelder beobachtet, siehe Abbildung 7.6b im Vergleich zu Abbildung 7.6a. Hier werden Trajektorien im Phasenraum der Geschwindigkeitskomponenten $U(\mathbf{x}_0, T)$ und $V(\mathbf{x}_0, T)$, aufgenommen an einem festen Ort $\mathbf{x}_0 = (42.4D, 0)^T$ stromab des Hindernisses, gezeigt¹. Während sich für $\Pi_y = 15$ ein periodischer Grenzzyklus

¹Zugunsten einer besser erkennbaren Darstellung sind die Achsen an die jeweiligen Amplituden angepaßt. Die Amplituden der Geschwindigkeitskomponenten U, V im Fall $\Pi_y = 15$ sind deutlich geringer als im Fall $\Pi_y = 30$.

einstellt (vgl. Abbildung 7.6a), lassen sich im Fall $\Pi_y = 30$ keinerlei geordnete Strukturen mehr identifizieren (vgl. Abbildung 7.6b). Dies wird auch in den zugehörigen Spektren der V -Zeitreihen deutlich. In Abbildung 7.6c für $\Pi_y = 15$ erscheinen ausschließlich Anteile bei der Anregungsfrequenz $F = 1.4$; für $\Pi_y = 30$ hingegen zeigt Abbildung 7.6d ein breitbandiges Spektrum. Es treten sowohl größere, aber vor allem auch kleinere Frequenzen als $F = 1.4$ auf, was auf eine Frequenzverdopplungskaskade hinweist. Zwischen $\Pi_y = 15$ und $\Pi_y = 30$ ändert sich die Systemantwort auf die äußere Anregung offensichtlich qualitativ.

a



b

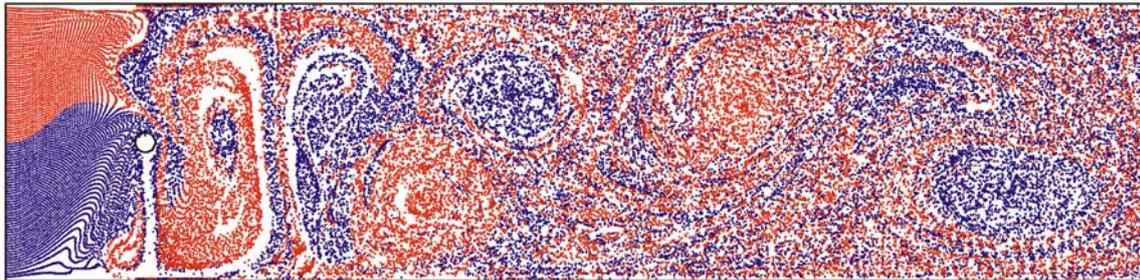


Abbildung 7.5: Momentane Partikelverteilungen bei der Umströmung des Hindernisses im geraden Kanal mit den Anregungsamplituden (a) $\Pi_y = 15$ bzw. (b) $\Pi_y = 30$.

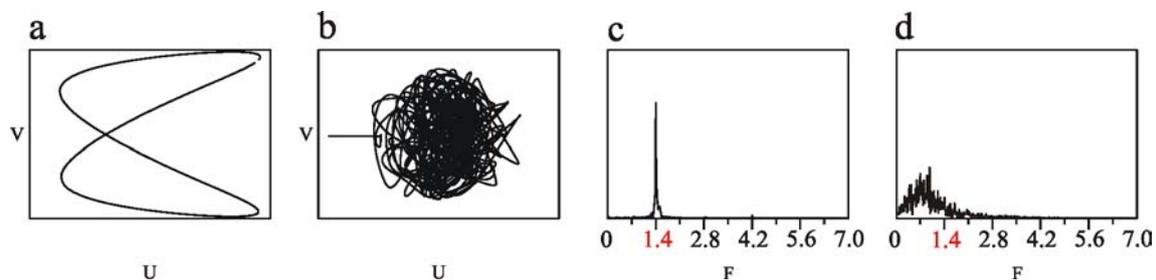


Abbildung 7.6: Trajektorien im Phasenraum (U, V) für die Anregungsamplituden (a) $\Pi_y = 15$ und (b) $\Pi_y = 30$ sowie zugehörige Frequenzspektren der V -Geschwindigkeitskomponente für (c) $\Pi_y = 15$ bzw. (d) $\Pi_y = 30$.

Die Beobachtung, daß eine größere Anregungsamplitude bessere Vermischung bedeutet, wird weiterhin durch Abbildung 7.7a auch quantitativ bestätigt. Hier ist die

Entwicklung der Länge eines Teils der Grenzflächen mit fortschreitender Zeit T für die beiden Fälle $\Pi_y = 15$ und $\Pi_y = 30$ gezeigt. Es ergibt sich in beiden Fällen ein exponentielles Wachstum, welches jedoch bei großer Anregungsamplitude deutlich früher einsetzt und steiler verläuft. Die Abbildungen 7.7b und 7.7c zeigen exemplarisch den markierten Teil der Grenzflächen zu Beginn und zu einem späteren Zeitpunkt für die beiden Anregungsamplituden $\Pi_y = 15$ und $\Pi_y = 30$. Offensichtlich bedingt die zugrundeliegende Strömung in beiden Fällen eine sehr komplexe Vergrößerung und Auffaltung der Grenzfläche. Wie aus dem Vergleich der beiden blauen Kurven in den Abbildungen 7.7b und 7.7c deutlich wird, ist die Grenzfläche zum Zeitpunkt $T = 190\Delta t$ durch die Anregung mit $\Pi_y = 30$ deutlich stärker gelängt und aufgefaltet worden als durch die Anregung mit $\Pi_y = 15$.

In Abbildung 7.7c ist erkennbar, daß die Partikel für große Anregungsamplituden nicht überall einen glatten Verlauf der Grenzfläche liefern. Eine Ursache hierfür könnte das explizite Runge-Kutta-Verfahren zur Integration der Partikelgleichungen (6.5) sein, welches bei der hier gewählten Zeitschrittweite in Kombination mit den auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten evtl. ein feineres Rechengitter benötigt. Auf eine weitergehende Analyse wird hier verzichtet, da zum einen solch große Anregungsamplituden in der Praxis nur schwer erzeugt werden können, und zum anderen eine genauere Behandlung einen enormen Mehraufwand darstellen würde.

Abschließend soll die in Kapitel 6.4 eingeführte Vermischungsgüte auf die beiden Fälle angewendet werden. Abbildung 7.8 zeigt die Autokorrelationen der idealen (rot) und der schlechtestmöglichen (grün) Vermischung sowie für die hier zu bewertenden Konzentrationsprofile am Mischerauslaß (blau) für $\Pi_y = 15$ und $\Pi_y = 30$; zusätzlich sind die Werte für die Vermischungsgüte Q nach Definition (6.12) eingetragen. Das Konzentrationsprofil am Mischerauslaß wird in beiden Fällen mit $D = 64$ Bilanzzellen aufgelöst, und die Partikel werden über einen Zeitraum von $\Delta t_B = 100\Delta t$ bilanziert, was gerade einer Periode der Anregung entspricht. Wie deutlich wird, liefern beide Anregungsamplituden mit $Q = 0.949$ bzw. $Q = 0.967$ eine gute Vermischung. Die Vermischungsgüte Q bei großer Anregungsamplitude ist erwartungsgemäß größer.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß mit einem internen Hindernis im Mischkanal eine Verbesserung der Vermischung erreicht werden kann. Das Konzentrationsprofil am Mischeraustritt hängt ab von der Geometrie des Mischkanals, der mittleren axialen Strömungsgeschwindigkeit im Mischer sowie der gewählten Anregungsamplitude und -frequenz. Die Vermischungsgüte steigt insbesondere monoton mit der Anregungsamplitude, während es für die Anregungsfrequenz jeweils ein Optimum gibt. Da die elektrische Feldstärke in der Praxis nicht beliebig hoch gewählt werden kann, besteht auch die Möglichkeit, mehrere Hindernisse hintereinander in den Kanal einzubringen, um so die Vermischungsgüte zu verbessern. Dann treten zusätzliche Parameter auf, beispielsweise der axiale Abstand der Hindernisse, oder ein Versatz der Hindernisse quer zur Hauptströmung. Diese zusätzlichen Parameter müssen dann bezüglich der Mischereffizienz optimiert werden.

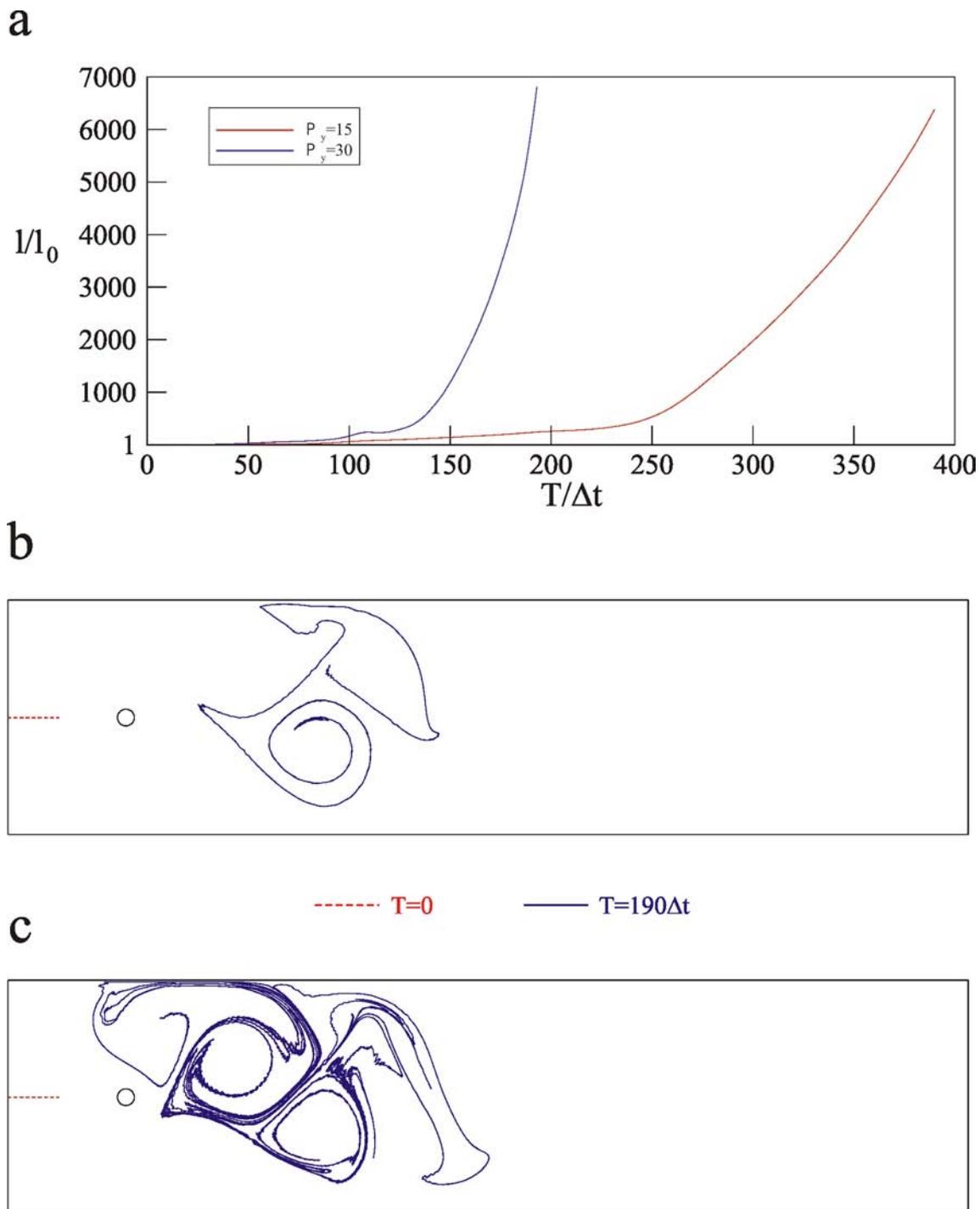


Abbildung 7.7: (a) Entwicklung der Länge eines Teils der Grenzflächen in der Zeit T für $\Pi_y = 15$ und $\Pi_y = 30$, (b) markierter Teil der Grenzfläche zu Beginn ($T = 0\Delta t$) und zu einem späteren Zeitpunkt ($T = 190\Delta t$) für $\Pi_y = 15$, (c) dto. für $\Pi_y = 30$.

7.3 Aufgefalteter Mäander-Mischkanal

Der in Kapitel 7.2 diskutierte Mischerkanal mit internem Hindernis eignet sich zwar prinzipiell zur Vermischung von Flüssigkeiten, jedoch stellt es eine große fertigungs-

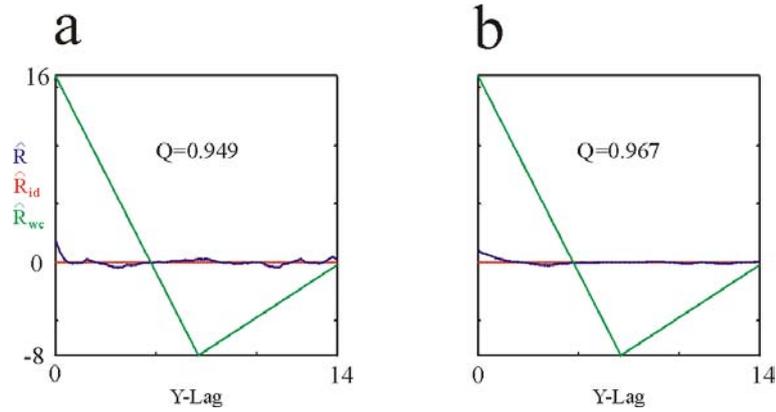


Abbildung 7.8: Autokorrelationen und Vermischungsgüte Q nach (6.12) für $D = 64$ Bilanzzellen und einen Bilanzzeitraum von $\Delta t_B = 100\Delta t$, am Auslaß des Mischers mit internem Hindernis: (a) $\Pi_y = 15$, (b) $\Pi_y = 30$.

technische Herausforderung dar, ein kleines Objekt in einem Mikrokanal zu platzieren. Daher wird in diesem Kapitel die Mischergeometrie aus Abbildung 7.1b untersucht, welche deutlich einfacher zu fertigen ist, zumindest wenn man aus fertigungstechnischen Gründen in den Ecken der Geometrie kleine Radien zuläßt.

Abbildung 7.9a zeigt anhand von Stromlinien die stationäre Innenströmung ohne elektrische Anregung. Die Kanal-Reynolds-Zahl $Re = u_0 d_0 / \nu$ beträgt $Re = 10$. Im Fall der stationären Strömung ohne elektrische Anregung findet man kleine, stationäre Wirbel in den inneren Ecken des Kanals, welche vollständig innerhalb einer Flüssigkeit bleiben und somit nicht zur Vermischung beitragen können. Lediglich entlang der Grenzfläche kann die molekulare Diffusion die beiden Flüssigkeiten vermischen. Dies wird auch in Abbildung 7.10a deutlich, wo das Konzentrationsfeld in der stationären Strömung eine dünne Konzentrationsgrenzschicht zeigt. Diese Rechnungen wurden für dieselben Parameterwerte (Kanal-Reynolds-Zahl, Anregungsamplitude und -frequenz) durchgeführt wie in Abbildung 7.9. Die Schmidt-Zahl $Sc = \nu / D$, gebildet mit der kinematischen Viskosität ν und der Stoffdiffusivität D der Flüssigkeiten, beträgt $Sc = 100$.

Unter dem Einfluß einer elektrischen Anregung hingegen bildet sich ein komplexes, periodisches Strömungsfeld aus, wie Abbildung 7.9b deutlich macht. Hier sind typische Stromlinienverteilungen für eine Anregungsamplitude $(\Pi_x, \Pi_y)^T = (0, 6)^T$ und eine dimensionslose Anregungsfrequenz von $F = 1.4$ zu vier verschiedenen Zeitpunkten während einer Anregungsperiode T_0 gezeigt. Man findet zahlreiche Wirbel, welche eine ausreichend große räumliche Ausdehnung haben, um die Flüssigkeiten wirksam miteinander zu vermischen. Eine Momentaufnahme des Konzentrationsfeldes im instationären Fall ist in Abbildung 7.10b gezeigt. Obwohl das zugrundeliegende Geschwindigkeitsfeld zeitlich periodisch ist, ergibt sich durch den akkumulierten Stofftransport ein irreguläres Konzentrationsfeld. Die numerische Lösung der Stofftransportgleichung erweist sich für die Schmidt-Zahl von $Sc = 100$ als schwierig. In Abbildung 7.10b sind an einigen Stellen räumlich periodische Oszillationen der Konzentration zu erkennen, welche auf ein zu grobes Rechengitter hinweisen. Diese

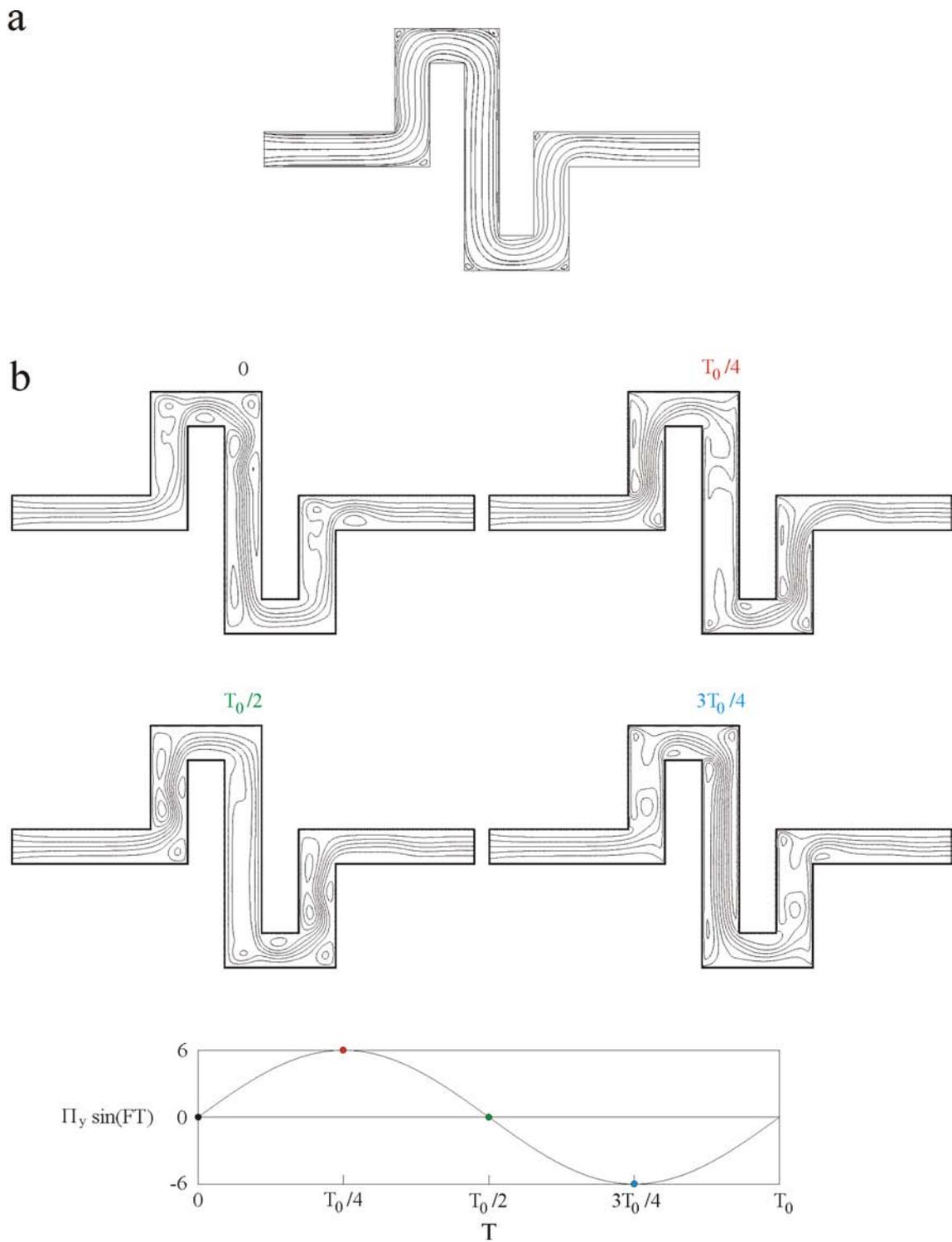


Abbildung 7.9: Stromlinien der Innenströmung im Mäander-Kanal (a) ohne elektrische Anregung (stationäre Strömung) und (b) für die Anregungsfrequenz $F = 1.4$ und die Anregungsamplitude $\Pi_y = 6$, zu vier Zeitpunkten $T = 0, T_0/4, T_0/2, 3T_0/4$ innerhalb einer Anregungsperiode $T_0 = 1/F$.

Oszillationen wären nur durch ein feineres Rechengitter zu beseitigen. Hier erweist sich die Partikelverfolgung als eher geeignetes Werkzeug, um das Konzentrationsfeld am Mischeraustritt zu erhalten.

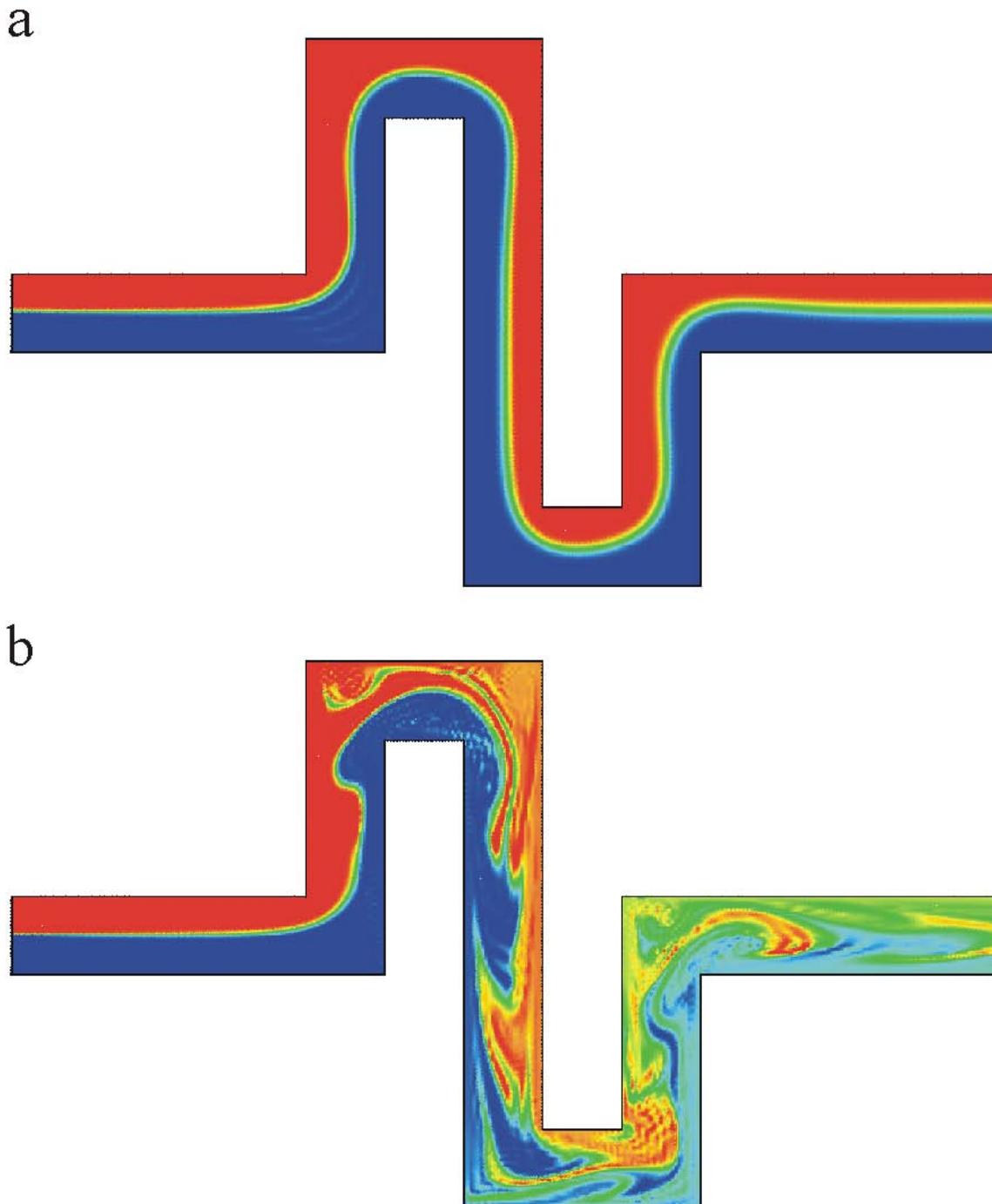


Abbildung 7.10: Konzentrationsfeld der Innenströmung im Mäander-Kanal aus der Lösung der Stofftransportgleichung (a) ohne elektrische Anregung (stationäre Strömung) und (b) Momentanbild des Konzentrationsfeldes für die Anregungsfrequenz $F = 1.4$ und die Amplitude $\Pi_y = 6$.

Abbildung 7.11 vergleicht das Ergebnis der Partikelverfolgung nach der in Kapitel 6.4 beschriebenen Methode mit der Iso-Konzentrationslinie $c = 0.5$ (schwarz) aus dem Konzentrationsfeld in Abbildung 7.10b. Es ist zu erkennen, daß die Isolinie erwartungsgemäß etwa dort zu liegen kommt, wo rote Partikel an blaue Partikel grenzen. Weiterhin wird deutlich, daß die Berechnung des Konzentrationsfeldes aus der Stofftransportgleichung mehr Diffusion aufweist als der rein konvektive Transport der Partikel bei der Partikelverfolgung. Demgemäß ist das Konzentrationsfeld in Abbildung 7.10b weniger fein strukturiert als die Partikelverteilung in Abbildung 7.11, weil insbesondere feine Lamellen mit z.B. hoher Konzentration durch Diffusion verschmiert werden oder gar vollständig verschwinden.

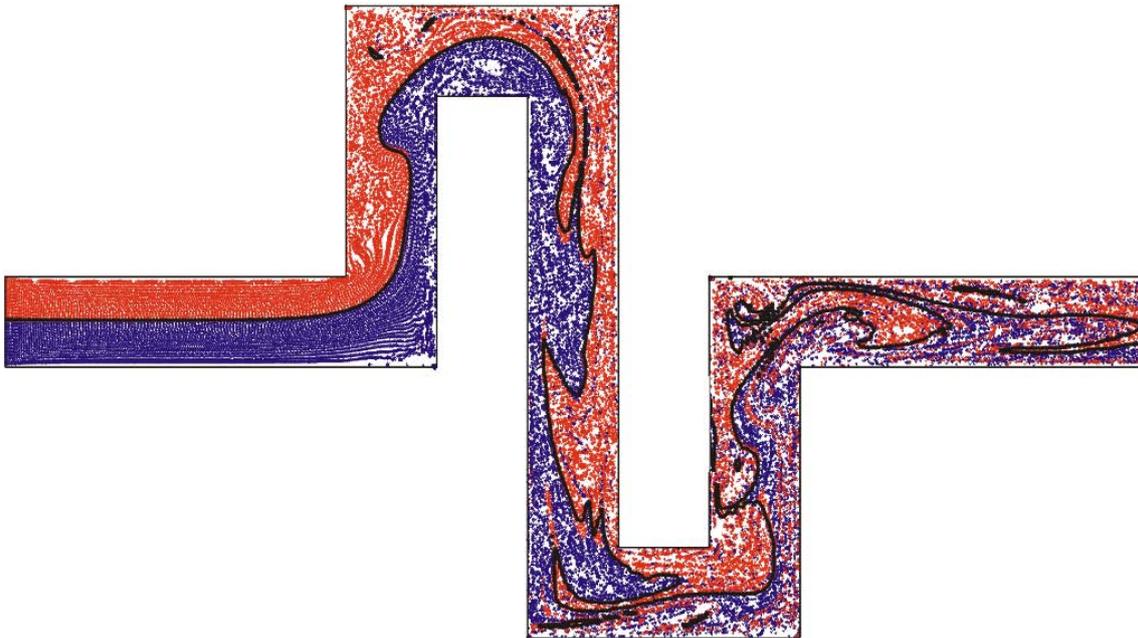


Abbildung 7.11: Momentanbild der Partikelverteilung und Isolinie der Konzentration $c = 0.5$ (schwarz) für die Anregungsfrequenz $F = 1.4$ und die Amplitude $\Pi_y = 6$.

Der qualitative Eindruck guter Vermischung aus den Abbildungen 7.10b und 7.11 wird durch Abbildung 7.12a bestätigt. Das hier gezeigte Momentanbild der Grenzfläche weist vielfache Faltungen und eine starke Vergrößerung der Grenzfläche auf. Man findet, ebenso wie im Fall des Mischers mit internem Hindernis, ein exponentielles Wachstum der Grenzfläche, siehe Abbildung 7.12b. Dieses schnelle Wachstum bringt jedoch auch einen ebenso stark anwachsenden Rechenaufwand mit sich, da kontinuierlich zusätzliche Partikel auf der Grenzfläche eingefügt werden müssen, um ein ausreichend genaues Verfolgen der Grenzfläche zu ermöglichen (vgl. Kapitel 6.2). Daher mußte die Simulation zum in Abbildung 7.12b markierten Zeitpunkt aus Rechenzeitgründen abgebrochen werden; die Darstellung der Grenzfläche aus Abbildung 7.12a entpricht gerade diesem Zeitpunkt. Der exponentiell anwachsende Rechenaufwand ist bezeichnend für die exponentiell zunehmende Komplexität des Problems. Dies führt zu der Erkenntnis, daß der Vermischungsvorgang in einem einigermaßen effizienten Mischer auf den heute zur Verfügung stehenden Rechenan-

lagen nur mit ganz erheblichem Aufwand (oder, so wie hier, nur zum Teil) simuliert werden kann.

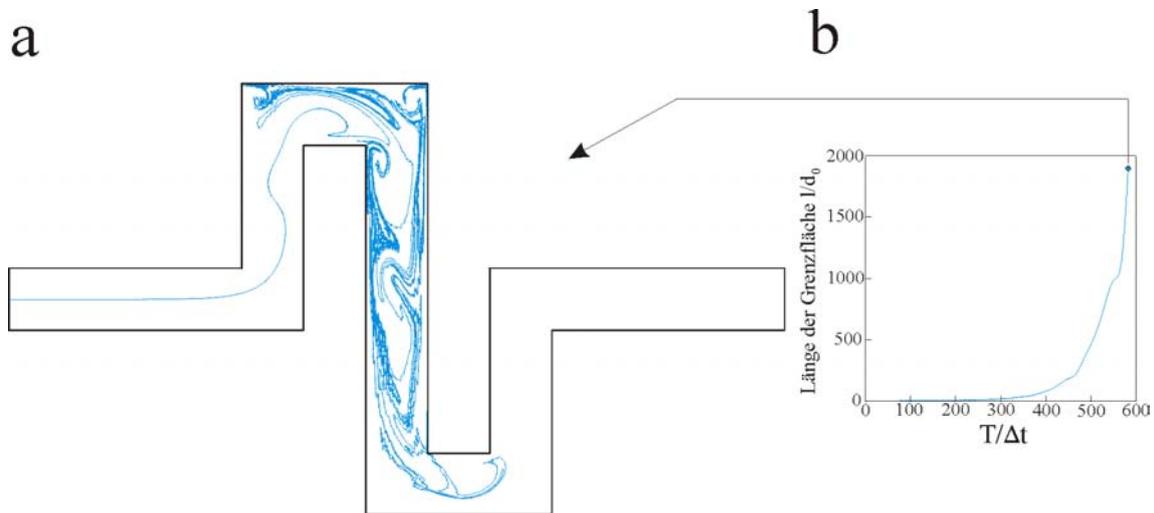


Abbildung 7.12: (a) Momentane Grenzflächenposition und -form sowie (b) Grenzflächenwachstum in der Zeit T für die Anregungsfrequenz $F = 1.4$ und die Amplitude $\Pi_y = 6$.

Um die Effizienz des Mäander-Mischkanals auch quantitativ zu erfassen, wird wiederum die Vermischungsgüte Q nach Definition (6.12) ermittelt. Die Autokorrelation und die Vermischungsgüte Q sind in Abbildung 7.13 dargestellt. Die Autokorrelation \hat{R} (blau) weicht offensichtlich nur schwach von der Autokorrelation \hat{R}_{id} der idealen Vermischung (rot) ab. In der Folge ergibt sich ein hoher Wert Q , welcher die Vermischungseffizienz des Mäander-Mischkanals auch zahlenmäßig belegt.

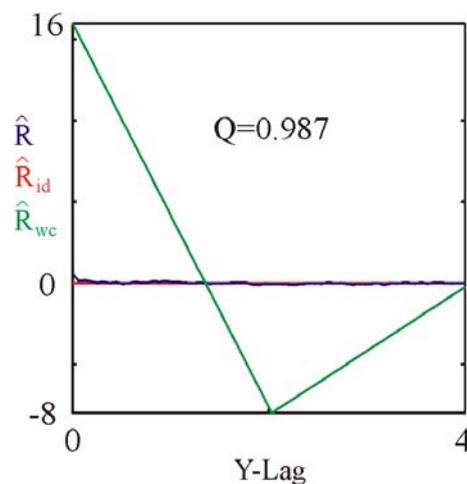


Abbildung 7.13: Autokorrelation und Vermischungsgüte Q nach (6.12) des Konzentrationsprofils für $D = 64$ Bilanzzellen und den Bilanzzeitraum $\Delta t_B = 100\Delta t$ am Auslaß des Mäander-Mischers für die Anregungsfrequenz $F = 1.4$ und die Amplitude $\Pi_y = 6$.

Offenbar läßt sich mit dem einfach aufgefalteten Mäanderkanal, ebenso wie mit dem in Kapitel 7.2 diskutierten Kanal mit internem Hindernis, eine gute Vermischung erzielen. Die hier vorgestellte Mäander-Geometrie ist leichter zu fertigen als ein Kanal mit internem Hindernis. Innerhalb nur einer Mäander-Periode werden die beiden Flüssigkeiten effizient miteinander vermischt, besser als im Kanal mit internem Hindernis. Bei Bedarf, etwa wegen eingeschränkter elektrischer Feldstärke, lassen sich auch mehrere Mäander hintereinander anordnen, um die Vermischung weiter zu intensivieren. Die Geometrie des Mehrfach-Mäanders, die mittlere Strömungsgeschwindigkeit sowie Anregungsamplitude und -frequenz beeinflussen das Mischergebnis. Diese Parameter sind im Hinblick auf eine möglichst gute Vermischung zu optimieren.

In der vorliegenden Arbeit wurden ausschließlich zweidimensionale Simulationen durchgeführt; es ist jedoch zu erwarten, daß die dritte Raumrichtung einen Einfluß auf die Mischerströmung haben wird. Aufgrund der Zentrifugalkräfte bildet sich in jeder der Mäanderumlenkungen eine zusätzliche Sekundärströmung aus, welche sich der Hauptströmung und der elektrisch induzierten Sekundärströmung überlagert; diese zusätzliche Sekundärströmung besteht aus paarweise gegensätzlich rotierenden, sog. Dean-Wirbeln. Laut [55] verschwinden die Dean-Wirbel bei der Kanal-Reynolds-Zahl $Re = 10$ innerhalb von etwa zehn Kanaldurchmessern aufgrund der viskosen Dämpfung. Angesichts der hier verwendeten Geometrie des Mäanderkanals mit relativ kurzen Zwischenstücken zwischen den Umlenkungen ist die Sekundärströmung demnach nicht auf einen kleinen Bereich in der Umgebung der Umlenkung beschränkt, sondern erstreckt sich über die gesamte Kanallänge bis hin zur nächsten, stromab gelegenen Umlenkung. Weiterhin wird die Sekundärströmung laut [37] sogar gezielt zur Blutplasmatrengnung in gekrümmten Mikrokanälen ausgenutzt; dies zeigt, daß dieser Effekt bei geeigneter Wahl der Betriebsparameter einen deutlichen Einfluß auf die Hauptströmung haben kann. Andererseits postuliert [55] ein lediglich lineares Wachstum der Grenzfläche mit der Anzahl der 90°-Umlenkungen. Dies wiederum deutet darauf hin, daß keine signifikante Verbesserung des Mäander-Mischers durch die Dean-Wirbel mehr erreicht werden kann; die geringe Anzahl der Umlenkungen im Mäander-Mischkanal und das exponentielle Grenzflächenwachstum allein aufgrund der elektrischen Erregung, siehe Abbildung 7.12b, sprechen dafür, daß bei den hier üblichen, kleinen Kanal-Reynolds-Zahlen die Auswirkung der elektrischen Anregung deutlich über den Einfluß der Dean-Wirbel dominiert.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit hat zum Ziel, einen unter dem Aspekt der Vermischung bisher wenig beachteten physikalischen Effekt zu bewerten. Elektrische Felder im Zusammenspiel mit der elektrischen Doppelschicht (EDL) sollen auf ihre Eignung zur effizienten Vermischung von Flüssigkeiten in mikrofluidischen Strukturen hin untersucht werden. Hierzu muß die Vermischung quantitativ mit Hilfe der Vermischungsgüte bewertet werden. Es wird ein asymptotisches Modell zur Behandlung der elektrischen Doppelschicht entwickelt und mit anderen, in der Literatur vorhandenen Modellansätzen verglichen. Es zeigt sich, daß mit Hilfe der asymptotischen Anpassung einer wandnahen Lösung eine Vereinfachung in die numerische Lösung der Bulkströmung eingebracht werden kann. Der Einfluß der EDL auf den Mischvorgang in der Bulkströmung wird so berücksichtigt und gleichzeitig der Rechenaufwand für die numerischen Simulationen der ganzen Mischerströmung deutlich vermindert. Im Detail sind es Anpassungsbedingungen, welche die Auswirkungen der elektrischen Doppelschicht auf die ganze Strömung einbringen und so die numerische Auflösung der EDL überflüssig machen. Dies bedeutet deutliche Einsparungen im numerischen Aufwand. Weiterhin wird ein niedrigdimensionales Modell für queroszillierende Kanalströmungen abgeleitet, mit welchem zeitabhängige Modellströmungen berechnet werden können. Dieses Modell hilft bei der Ableitung und dem Test der Vermischungsgüte, welche als quantitatives Maß zur Bewertung der Vermischung herangezogen wird. Die Vermischungsgüte basiert auf einer Näherung für das Konzentrationsprofil am Auslaß der Mikromischers. Diese Näherung wird aus der Verteilung von passiven, masselosen und schlupffrei der Strömung folgenden Partikeln abgeleitet, mit welchen die beiden Flüssigkeiten markiert werden. Alternativ ist auch eine Lösung der Stofftransportgleichung als Basis des Konzentrationsfeldes möglich. Zusätzlich werden weitere Methoden zur Vermischungsbewertung auf Grundlage der Grenzfläche zwischen den zu mischenden Flüssigkeiten aufgezeigt.

Anwendung finden die genannten Methoden bei der Erprobung zweier verschiedener Mischergeometrien, dem geraden Kanal mit internem Hindernis und dem aufgefalteten Mäanderkanal. Die wesentlichen Parameter werden variiert, und es werden Regeln zur Realisierung einer effizienten, elektrisch erregten Vermischung von Flüssigkeiten in mikrofluidischen Mixern abgeleitet. Es zeigt sich, daß mit beiden Mischerkonzepten eine gute Gemischqualität erreicht werden kann. Das Ergebnis hängt im Wesentlichen ab von der gewählten Geometrie, der mittleren axialen Strömungsgeschwindigkeit, der Amplitude der angelegten Feldstärke sowie der Anregungsfrequenz. Das Mischergebnis läßt sich noch weiter verbessern, wenn mehrere Hindernisse im Kanal oder mehrere Mäander hintereinander angeordnet werden; dann sind auch Optimierungen bezüglich des Abstandes der einzelnen Hindernisse möglich, oder Variationen der Mäanderform (z.B. Ausdehnung einer Mäander-Periode in Längs- und Querrichtung).

In dieser Arbeit werden einige Vereinfachungen bezüglich der physikalischen Gegebenheiten vorgenommen, um die Betrachtungen weitgehend analytischen Methoden zugänglich zu machen. Ein wichtiger Punkt ist die Annahme, daß das Wandmaterial und die Flüssigkeiten dieselbe relative Dielektrizitätskonstante ε_r haben. In der Realität ändert sich diese Stoffgröße beim Übergang von der Wand in das Fluid um etwa eine Größenordnung. Zwar wird die wandnormale Auswirkung dieses Sprungs durch die Ladungsverteilung in der EDL modelliert, doch ist auch eine Modifikation des angelegten elektrischen Feldes durch die verschiedenen Materialien zu erwarten. Eine genauere Behandlung muß demnach das homogene angelegte elektrische Feld durch eine numerische Lösung der Feldgleichung bei Berücksichtigung der ortsabhängigen Dielektrizität ersetzen. Außerdem werden alle weiteren Stoffeigenschaften der zu mischenden Flüssigkeiten als gleich angenommen. Effekte wie die Ausbildung unterschiedlicher EDLs in beiden Flüssigkeiten, verschiedene Viskositäten o.ä. würden die Symmetrie der Strömung brechen und neue Effekte ins Spiel bringen. Das Modell für die elektrische Doppelschicht ist durch eine Linearisierung in seiner Gültigkeit auf kleine Wandladungen beschränkt. Eine Erweiterung des Modells auf große Wandladungen wird etwa von [27] angegeben.

Eine Verbesserung des niedrigdimensionalen Modells wäre etwa die Verwendung divergenzfreier Basissysteme, z.B. nach [17], da hierdurch die Anzahl der Moden weiter verringert werden könnte. Wie oben erwähnt, können die in der vorliegenden Arbeit behandelten Mischergeometrien (internes Hindernis, Mäanderkanal) auch in Mehrfachanordnung kombiniert werden, um die Vermischung weiter zu verbessern. Die Untersuchung und Optimierung solcher Anordnungen mit der Zielsetzung, räumliche und zeitliche Resonanz zu erreichen, erscheint vielversprechend. Da mikrofluidische Strukturen in der Regel Aspektverhältnisse (Kanalweite zu -höhe) in der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ aufweisen, ist mit einem Einfluß der dritten Raumrichtung zu rechnen. Die Begrenzung der hier zweidimensional behandelten Kanäle in der dritten Raumrichtung führt etwa zu Wänden, welche gleichfalls tangential zum elektrischen Feld ausgerichtet sind. Dreidimensionale Simulationen würden den Einfluß der dort induzierten, elektroosmotischen Strömung klären; es ist zu erwarten, daß diese zusätzliche Sekundärströmung sowohl im geraden Kanal mit internem Hindernis als auch im Mäanderkanal deutliche Auswirkungen auf die Gesamtströmung haben wird. Der Einfluß der durch Zentrifugalkräfte induzierten Dean-Wirbel in den Umlenkungen des Mäander-Kanals auf die Gesamtströmung kann ebenfalls nur durch weitere numerische Simulationen abgeschätzt werden. Es ist zu erwarten, daß bei den in Mikromischern üblichen, kleinen Reynolds-Zahlen die Grenzflächenvergrößerung durch Dean-Wirbel nicht maßgeblich verbessert werden kann, siehe dazu auch die Erörterungen in Kapitel 7.3.

Die Partikelverfolgung hat sich als geeignet erwiesen, um eine Näherung für das Konzentrationsfeld im Mischerkanal und insbesondere für das Konzentrationsprofil am Mischeraußlaß zu bestimmen. Da diese Näherung auf statistischen Methoden beruht, wird die Genauigkeit der berechneten Konzentration mit wachsender Partikelzahl steigen; mit der Partikelzahl steigt jedoch auch der Rechenaufwand an. Daher ist es wünschenswert, die Algorithmen zur Lösung der Partikel-Bewegungsgleichungen weiter zu verbessern und insbesondere zu beschleunigen. Da die Partikel nicht mit-

einander wechselwirken und auch nicht auf die Strömung zurückwirken, läßt sich die Verfolgung eines Partikelschwarms ideal parallelisieren, mit minimalem Kommunikations-Overhead. Die parallel auf verschiedenen Prozessoren oder Rechenanlagen erhaltenen Ergebnisse zur Bewegung verschiedener Partikel-Kollektive müssen lediglich anschließend zusammengeführt werden.

Anhang A

Lösung der linearisierten Poisson-Boltzmann-Gleichung

Die linearisierte Poisson-Boltzmann-Gleichung (2.10) wird mit $2\psi_y$ geeignet erweitert zu

$$2\psi_y\psi_{yy} = 2\kappa^2\psi\psi_y \quad . \quad (\text{A.1})$$

Wegen der Identität $2\psi_y\psi_{yy} = (\psi_y^2)_y$ kommt

$$(\psi_y^2)_y = 2\kappa^2\psi\frac{d\psi}{dy} \quad , \quad (\text{A.2})$$

und Integration vom Bulk ($y = \infty$) bis zu einem Punkt y in der EDL liefert

$$\int_{y=\infty}^y (\psi_y^2)_y dy = 2\kappa^2 \int_{y=\infty}^y \psi \frac{d\psi}{dy} dy \quad , \quad (\text{A.3})$$

und weiter

$$[\psi_y^2]_{y=\infty}^y = 2\kappa^2 \left[\frac{\psi^2}{2} \right]_{y=\infty}^y \quad . \quad (\text{A.4})$$

Mit der Randbedingung (2.13) und wegen $\psi(y \rightarrow \infty) = 0$ erhält man

$$\psi_y^2 = \kappa^2\psi^2 \quad . \quad (\text{A.5})$$

Nach Wurzelziehen behält man die Lösung

$$\psi_y = -\kappa\psi \quad , \quad (\text{A.6})$$

damit das Potential für große Wandabstände $y \rightarrow \infty$ immer gegen Null strebt, unabhängig davon, ob das Wandpotential ψ_W positiv oder negativ ist. Integriert man dieses Ergebnis unbestimmt gemäß

$$\int \frac{d\psi}{\psi} = -\kappa \int dy \quad , \quad (\text{A.7})$$

so erhält man

$$\ln \psi = -\kappa\psi + C \quad , \quad (\text{A.8})$$

und mit der Randbedingung (2.12) wird die Integrationskonstante C festgelegt zu $C = \ln \psi_W$. Eingesetzt in Gleichung (A.8) und nach ψ aufgelöst kommt Gleichung (2.14).

Literatur

- [1] Adamson, A.W. *Physical chemistry of surfaces*. J. Wiley & Sons, 1990.
- [2] Aref, H. Integrable, chaotic, and turbulent vortex motion in two-dimensional flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 15:345–389, 1983.
- [3] Aref, H. und El Naschie, M.S. *Chaos applied to fluid mixing*. Pergamon Press, 1995.
- [4] Arfken, G.B. und Weber, H.J. *Mathematical methods for physicists*. Academic Press, 1995.
- [5] Bau, H.H., Zhong, J., und Yi, M. A minute magneto hydro dynamic (MHD) mixer. *Sens. Actuators B*, 79:207–215, 2001.
- [6] Beebe, D.J., Adrian, R.J., Olsen, M.G., Stremmer, M.A., Aref, H., und Jo, B.-H. Passive mixing in microchannels: Fabrication and flow experiments. *Mec. Ind.*, 2:343–348, 2001.
- [7] Bockris, J., Devanathan, M.A.V., und Müller, K. On the structure of charged interfaces. *Proc. Roy. Soc.*, A274:55–79, 1963.
- [8] Boyd, J.P. *Chebyshev and Fourier spectral methods*. Dover, 2001.
- [9] Canuto, C., Hussaini, M.Y., Quarteroni, A., und Zang, T.A. *Spectral methods in fluid dynamics*. Springer, 1988.
- [10] Chapman, D.L. A contribution to the theory of electrocapillarity. *Phil. Mag.*, 25:475, 1913.
- [11] Debye, P. und Hückel, E. Zur Theorie der Elektrolyte, I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte Erscheinungen. *Phys. Z.*, 24:185–206, 1923.
- [12] Ehrhard, P. Strömungs- und Transportprozesse in Mikrokanälen. Vorlesungsskriptum Universität Karlsruhe, WS 2002/03.
- [13] Ehrhard, P. und Meisel, I. Strömungs- und Transportprozesse in Mikrokanälen, Berichte des Forschungszentrums Karlsruhe, FZKA 6680.
- [14] Fletcher, C.A.J. *Computational Galerkin methods*. Springer, 1984.
- [15] Fluent Inc., Lebanon, USA. FIDAP 8.7.0 User Manual.
- [16] Fornberg, B. *A practical guide to pseudospectral methods*. Cambridge Univ. Press, 1996.
- [17] Gelfgat, A.Y. und Tanasawa, I. Numerical analysis of oscillatory instability of buoyancy convection with the Galerkin spectral method. *Num. Heat Transfer A*, 25:627–648, 1994.
- [18] Gottlieb, D. und Orszag, S.A. *Numerical analysis of spectral methods: theory and applications*. Society for Industrial & Applied Mathematics, 1977.
- [19] Gouy, G. Sur la constitution de la charge électrique à la surface d'un électrolyte. *J. Phys. radium*, 9:457, 1910.
- [20] Grahame, D.C. The electrical double layer and the theory of electrocapillarity. *Chem. Rev.*, 41:441–501, 1947.

- [21] Haydon, D.A. The electrical double layer and elektrokinetic phenomena. In: J.F. Danielli, K.G.A. Pankhurst, und A.C. Riddiford (Hrsg.), *Recent Progress in Surface Science, Vol. 1*, S. 94–158. Academic Press, 1964.
- [22] Helmholtz, H.L.F. Studien über elektrische Grenzschichten. *Ann. Phys.*, 7:337, 1853.
- [23] Hinch, E.J. *Perturbation methods*. Cambridge Univ. Press, 1994.
- [24] Holmes, P., Lumley, J.L., und Berkooz, G. *Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry*. Cambridge Univ. Press, 1998.
- [25] Hunter, R.J. *Zeta potential in colloid science: principles and applications*. Academic Press, 1981.
- [26] Israelachvili, J. *Intermolecular & surface forces*. Academic Press, 2. Auflage, 1992.
- [27] Janssens-Maenhout, G.G.A. und Schulenberg, T. An alternative description of the interfacial energy of a liquid in contact with a solid. *J. Colloid Interface Sci.*, 257:141–153, 2003.
- [28] Lagerstrom, P.A. und Casten, R.G. Basic concepts underlying singular perturbation techniques. *SIAM Rev.*, 14(1):63–120, 1972.
- [29] Liu, R.H., Stremmer, M.A., Sharp, K.V., Olsen, M.G., Santiago, J.G., Adrian, R.J., Aref, H., und Beebe, D.J. Passive mixing in a three-dimensional serpentine microchannel. *J. Microelectromech. Syst.*, 9(2):190–197, 2000.
- [30] Lu, L.-H., Ryu, K.S., und Liu, C. A magnetic microstirrer and array for microfluidic mixing. *J. Microelectromech. Syst.*, 11(5):462–469, 2002.
- [31] Manz, A., Graber, N., und Widmer, H.M. Miniaturized total chemical analysis systems: A novel concept for chemical sensing. *Sens. Actuators*, B1:244–248, 1990.
- [32] Meisel, I. und Ehrhard, P. Electrically-excited (electroosmotic) flows in microchannels for mixing applications. *Phys. Fluids, in press*.
- [33] Meisel, I. und Ehrhard, P. Simulation of electrically-excited flows in microchannels for mixing application. S. 62–65. Proc. MSM 2002, San Juan, Puerto Rico, USA, 21.-25.04. 2002.
- [34] Meisel, I., Ehrhard, P., und Schulenberg, T. Mikromischer für Flüssigkeiten und Verfahren zum Mischen von Flüssigkeiten, Offenlegungsschrift DE 102 13 003 A1, 2003.
- [35] Niu, X. und Lee, Y.-K. Efficient spatial-temporal chaotic mixing in microchannels. *J. Micromech. Microeng.*, 13:454–462, 2003.
- [36] Oddy, M.H., Santiago, J.G., und Mikkelsen, J.C. Electrokinetic instability micromixing. *Anal. Chem.*, 73:5822–5832, 2001.
- [37] Oertel, H. persönliche Mitteilung, 2004.
- [38] O’Malley, R.E. *Introduction to singular perturbations*. Academic Press, 1974.

-
- [39] Ottino, J.M. *The kinematics of mixing: stretching, chaos, and transport*. Cambridge Univ. Press, 1989.
- [40] Ottino, J.M. Mixing, chaotic advection, and turbulence. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 22:207–254, 1990.
- [41] Probstein, R.F. *Physicochemical hydrodynamics*. J. Wiley & Sons, 2. Auflage, 1994.
- [42] Qian, S. und Bau, H.H. A chaotic electroosmotic stirrer. *Anal. Chem.*, 74:3616–3625, 2002.
- [43] Qian, S., Zhu, J., und Bau, H.H. A stirrer for magnetohydrodynamically controlled minute fluidic networks. *Phys. Fluids*, 14(10):3584–3592, 2002.
- [44] Schlichting, H. und Gersten, K. *Grenzschicht-Theorie*. Springer, 1997.
- [45] Schneider, W. *Mathematische Methoden der Strömungslehre*. Vieweg, 1978.
- [46] Schwesinger, N., Frank, T., und Wurmus, H. A modular microfluid system with an integrated micromixer. *J. Micromech. Microeng.*, 6:99–102, 1996.
- [47] Shaw, D.J. *Introduction to colloid and surface chemistry*. Butterworths, 1980.
- [48] Sohankar, A., Norberg, C., und Davidson, L. Simulation of three-dimensional flow around a square cylinder at moderate Reynold numbers. *Phys. Fluids*, 11(2):288–306, 1999.
- [49] Stern, O. Zur Theorie der elektrischen Doppelschicht. *Z. Elektrochem.*, 30:508, 1924.
- [50] Stroock, A.D., Dertinger, S.K.W., Ajdari, A., Mezić, I., Stone, H.A., und Whitesides, G.M. Chaotic mixer for microchannels. *Science*, 295:647–651, 2002.
- [51] The MathWorks Inc., Natick, USA. MATLAB Version 6.
- [52] van Dyke, M. *Perturbation methods in fluid mechanics*. Parabolic Press, 1975.
- [53] Williamson, C.H.K. Defining a universal and continuous Strouhal-Reynolds number relationship for the laminar vortex shedding of a circular cylinder. *Phys. Fluids*, 31(10):2742–2744, 1988.
- [54] Yang, Z., Matsumoto, S., Goto, H., Matsumoto, M., und Maeda, R. Ultrasonic micromixer for microfluidic systems. *Sens. Actuators A*, 93:266–272, 2001.
- [55] Yi, M. und Bau, H.H. The kinematics of bend-induced mixing in microconduits. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 24:645–656, 2003.
- [56] Yi, M., Qian, S., und Bau, H.H. A magnetohydrodynamic chaotic stirrer. *J. Fluid Mech.*, 468:153–177, 2002.