Lokale Eigenschaften von Teilchenbahnen in chaotischen Strömungen



Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

dem Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg vorgelegt von

> Wolfgang Braun ^{aus} Marburg

> > Marburg, 2005

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg als Dissertation angenommen am 17.08.2005 Erstgutachter: Prof. Dr. Bruno Eckhardt Zweitgutachter: Prof. Dr. Holger Neumann Tag der mündlichen Prüfung: 23.08.2005

Inhaltsverzeichnis

Ab	bildu	ungsve	rzeichnis	v	
Та	belle	nverzei	ichnis	vii	
1.	Grundlagen				
	1.1.	Einleit	ung	1	
	1.2.	Grundl	agen der Navier-Stokes-Gleichung	3	
		1.2.1.	Erhaltung der Masse	3	
		1.2.2.	Zweites Newtonsches Axiom	4	
		1.2.3.	Energie	5	
		1.2.4.	Viskosität, Navier-Stokes Gleichung	5	
		1.2.5.	Voll entwickelte Turbulenz	7	
	1.3.	Viskoe	lastische Strömungen	9	
		1.3.1.	Auswirkungen von Polymeren auf Strömungen	10	
		1.3.2.	Polymere	13	
		1.3.3.	Polymerspannungstensor	15	
		1.3.4.	Zeitliche Entwicklung des Polymerspannungstensors	17	
	1.4.	Lyapur	novexponenten und Verteilungen von Polymerlängen	23	
		1.4.1.	Kurzzeit-Lyapunovexponenten	25	
		1.4.2.	Streckung von Polymeren	26	
		1.4.3.	Exponentielles Wachstum	28	
	1.5.	Geome	trische Eigenschaften der Trajektorien	28	
2.	ABC	C-Ström	nung	33	
	2.1.	Grundl	agen	33	
		2.1.1.	Symmetrien	33	
		2.1.2.	Ein integrabler Fall	34	
		2.1.3.	Fixpunkte	35	
	2.2.	Verteil	ung von Lyapunovexponenten und Polymerlängen	37	
	2.3.	Kritisc	he Deborahzahl	40	
	2.4.	Geome	trische Eigenschaften der Trajektorien	55	

3.	Niec	drigdimensionales Modell einer Scherströmung	59
	3.1.	Wirbel-Streifen-Wechselwirkung	62
	3.2.	Erweiterung zur viskoelastischen Scherströmung	65
		3.2.1. Renormierung der Reynoldszahl	68
		3.2.2. Wirbel-Streifen-Wechselwirkung	73
	3.3.	Geometrische Eigenschaften der Trajektorien	74
		3.3.1. Krümmung und Energiedissipation beim Stromabwärtswirbel	80
	3.4.	Linearisierung um die Gleichgewichtslage	82
		3.4.1. Lineare Stabilitätsanalyse des stationären Zustands	83
		3.4.2. Dreiphasiger Zyklus	87
	3.5.	Lebensdauer von finiten turbulenten Störungen	91
		3.5.1. Lebensdauern von eindimensionalen Störungen	92
		3.5.2. Lebensdauer von turbulenten Zuständen	96
	3.6.	Polymerlängenverteilungen und Lyapunovexponenten	105
4.	Zus	ammenfassung und Ausblick	107
Α.	Anh	lang	111
	A.1.	Koordinaten	111
	A.2.	Konvektierte Koordinatensysteme	112
	A.3.	Konvektive Ableitungen	113
	A.4.	Eulerbild und Lagrangebild	113
	A.5.	Allgemeinere ABC-Strömung	114
		A.5.1. Symmetrien	114
		A.5.2. Fixpunkte	115
	A.6.	Darstellung des 9-Moden-Modells im Programmcode	115
Lit	eratu	urverzeichnis	117

Abbildungsverzeichnis

1.1. 1.2. 1.3. 1.4.	Demonstration der turbulenten Widerstandsreduktion	12 13 14 29
 2.1. 2.2. 2.3. 2.4. 2.5. 2.6. 2.7. 2.8. 2.9. 2.10. 2.11. 2.12. 2.13. 2.14. 2.15. 2.16. 2.17. 2.18. 2.19. 2.20. 	Trajektorien in der ABC-StrömungLage der Fixpunkte und heteroklinen OrbitsVerteilung der KurzzeitlyapunovexponentenVerteilung sexponenten aus Momenten und LängenverteilungenVerteilung unbeschränkter Polymerlängen 1Verteilung unbeschränkter Polymerlängen 2Verteilung beschränkter Polymerlängen 2Verteilung beschränkter PolymerlängenVerteilung beschränkter PolymerlängenVerteilung beschränkter PolymerlängenVerteilung beschränkter PolymerlängenVergleich der Verteilungsparameter Δ Eigenwerte der Fixpunkte der ABC-Strömungtrĉ in der Umgebung eines FixpunktesExponenten der Zeitentwicklung von tr ĉ.Periodischer Orbit in der Ebene x = 0Exponenten der Zeitentwicklung von tr ĉ.Exponenten der Zeitentwicklung von tr ĉ.Polymerlänge am heteroklinen Orbit ohne RelaxationPolymerlänge am heteroklinen Orbit mit Relaxation auf endl. LängeVerteilung von Krümmung und Torsion in der ABC-Strömung (n = 0)Verteilung von Krümmung und Torsion in der ABC-Strömung (n = 2)	 34 36 38 39 41 42 43 44 45 46 47 48 49 51 53 54 56 57
2.21.	Gemeinsame Verteilung von Krümmung und LLE \ldots	58
 3.1. 3.2. 3.3. 3.4. 3.5. 3.6. 	Geometrie der Scherströmung	59 63 64 64 69 70

3.7.	Varianzen der Abweichung vom newtonschen Spannungstensor	71
3.8.	Energieübertrag von Wirbel auf Streifen abhängig von De	72
3.9.	Energieübertrag von Wirbel auf Streifen abhängig von s	72
3.10.	Energieübertrag von Wirbel auf Streifen abhängig von Re	73
3.11.	Maximale Streifenamplitude mit Störung in einer Polymermode	74
3.12.	Krümmung im laminaren Grundprofil mit $\mathbf{u}^{(3)}$	75
3.13.	Krümmung im laminaren Grundprofil mit $\mathbf{u}^{(4)}$ und $\mathbf{u}^{(5)}$	76
3.14.	Krümmung im laminaren Grundprofil mit $\mathbf{u}^{(6)}$ und $\mathbf{u}^{(7)}$	77
3.15.	Verteilung von κ in der Scherströmung	78
3.16.	Zeitverlauf der Verteilung von k in der Scherströmung	79
3.17.	Gemeinsame Verteilung von κ und ε_{loc}	80
3.18.	Vergleich ϵ_{loc} mit der Normalableitung der Krümmung	81
3.19.	Stabilitätsgrenzen des laminaren Profils	85
3.20.	Grenze der linearen Stabilität des laminaren Profils	86
3.21.	Dreiphasiger Zyklus	88
3.22.	Linearisierung im turbulenten Zustand	89
3.23.	Lineare und nichtlineare Anteile von u	90
3.24.	Lebensdauer von eindimensionalen Störungen des laminaren Profils .	94
3.25.	Lebensdauer von zweidimensionalen Störungen des laminaren Profils	95
3.26.	Lebensdauern von finiten turbulenten Störungen	95
3.27.	Steigungen der Lebensdauerverteilungen bei $Re = 200$	97
3.28.	Steigungen der Lebensdauerverteilungen bei $Re = 300$	98
3.29.	Steigungen der Lebensdauerverteilungen bei $Re = 400$	99
3.30.	Übergang zwischen newtonschem und viskoelastischem Verhalten	100
3.31.	Steigungen der Lebensdauerverteilungen mit $F \propto (1 + s)Re$	101
3.32.	Verteilung der Lyapunovexponenten	102
3.33.	Verteilung der Polymerlänge	103
3.34.	Exponenten der Polymerlängenverteilungen	104

Tabellenverzeichnis

1.1.	Spezialfälle der Lösungen für $R(t)$, (1.75).	18
1.2.	Daten zu Polymeren	24
1.3.	Daten zu Experimenten	24
3.1.	Kopplungen im 9-Moden-Modell	62
3.2.	Wellenzahlen der Geschwindigkeitsmoden	63
3.3.	Konstruktion der Polymermoden aus den Geschwindigkeitsmoden	67
3.4.	Kopplung Polymeramplituden	67
3.5.	Linearisierung um das laminare Profil	83
3.6.	Ausbreitung von eindimensionalen Störungen des laminaren Flusses .	93
3.7.	Ausbreitung von zweidimensionalen Störungen des laminaren Flusses	94

Tabellenverzeichnis

Bezeichnungen

Vektorgrößen

r	Ortsvektoren
г	Ortsvektoren

- **u** Geschwindigkeit des Fluids
- *ω* Vortizität
- **F** Federkraft
- **R** Polymerlänge
- S Flächenelement
- **n** Normaleneinheitsvektor

Skalare Größen

charakteristische Länge
charakteristische Geschwindigkeit
kartesische Koordinaten
Komponenten des Vektors u
Zeit
Zeitintervall
Varianz
Rohrdurchmesser
Lyapunovexponent
Kurzzeit-Lyapunovexponent über Zeitintervall T
Lokaler Lyapunovexponent
Druck
Dichte
Anzahldichte
Boltzmannkonstante
(zusammen mit Boltzmannkonstante k:) Temperatur
Widerstandsbeiwert

Tabellenverzeichnis

Materialeigenschaften

- η (erste) dynamische Viskosität
- η zweite dynamische Viskosität, Dehnungsviskosität
- *ζ* Reibungskoeffizient
- v kinematische Viskosität
- H Federkonstante
- G Elastizitätsmodul
- λ_H Relaxationszeit der Feder

Tensorgrößen

- $\hat{\delta}$ Dreidimensionaler Einheitstensor, Kroneckersymbol
- $\hat{\pi}$ Impulsflußtensor bzw. (totaler) Spannungstensor
- $\hat{\pi}_{s}$ (totaler) Spannungstensor des Lösungsmittels (*solvent*)
- $\hat{\pi}_{p}$ (totaler) Spannungstensor des Polymeranteils
- $\hat{\pi}_{p}^{(f)}$ Federanteil von π_{p}
- $\hat{\pi}_{p}^{(p)}$ Perlenanteil von π_{p}
- $\hat{\tau}$ Scherspannungstensor
- $\hat{\tau}_s$ Scherspannungstensor des Lösungsmittels
- $\hat{\tau}_p$ Scherspannungstensor des Polymeranteils
- ĉ Konformationstensor
- $\hat{\gamma}$ Verzerrung
- $\dot{\hat{\gamma}}$ Scherratentensor

Dimensionslose Größen

- Re Reynoldszahl
- De Deborahzahl
- We Weissenbergzahl

Operatoren

- $\langle . \rangle$ Erwartungswert bzw. Mittelwert
- ∂_t partielle Zeitableitung
- ∂_i partielle Ableitung nach der i-ten Komponente
- ∇ Nabla-Operator
- Δ Laplace-Operator
- $\|.\|_2$ Euklidische Norm
- $(.)^{\dagger}$ Transponierte Matrix

- $\eta=\rho\nu$
- $F=\zeta\dot{r}=6\pi\eta d\dot{r}$
- $u = \eta /
 ho$

1.1. Einleitung

Strömungen von Flüssigkeiten und Gasen – zusammenfassend als *Fluide*, fließende oder fließfähige Stoffe, bezeichnet – sind ein alltägliches Phänomen: Wind weht über Land und Meer, Wasser strömt in Flüssen, Seen und Meeren. Lebewesen atmen Luft, und Blut zirkuliert in ihren Blutgefäßen. Der Mensch sorgt mit komplexen Anlagen und Rohrsystemen für eine ausreichende Versorgung mit Trinkwasser und für die Entsorgung des Abwassers. Er führt Erdöl aus den Tiefen zu Tage und bringt es über weite Strecken an Orte, wo es zu Hilfsmitteln des täglichen Lebens verarbeitet wird. Ein großer Teil davon wird schließlich unter hohem Druck in die Brennkammern der Motoren versprüht, um die enthaltene Energie freizugeben.

Das Verhalten von Strömungen kann bei einfachen Fluiden durch die Navier-Stokes-Gleichung beschrieben werden. Diese Gleichung, wenn auch seit vielen Jahrzehnten bekannt, entzieht sich bisher einer allgemeinen analytischen Lösung. Für viele spezielle Probleme und Randbedingungen sind Lösungen angegeben worden, aber in den meisten Fällen bleibt nur eine näherungsweise, numerische Berechnung, die durch die fortschreitende Entwicklung der elektronischen Rechner mit immer größerer Präzision durchgeführt werden kann.

Die Navier-Stokes-Gleichung beschreibt die Entwicklung des Geschwindigkeitsfeldes $\mathbf{u}(\mathbf{r}; t)$ einer Strömung. Dieses Geschwindigkeitsfeld kann man als dynamisches System ansehen, das die Bewegung von Teilchen beschreibt,

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}; t) \,. \tag{1.1}$$

Die Lösungen $\mathbf{r}(\mathbf{r}_0; t)$ mit $\mathbf{r}(\mathbf{r}_0; 0) = \mathbf{r}_0$ sind die Trajektorien, die Bahnen von einzelnen Teilchen, von Volumenelementen des Fluids oder von in der Strömung (ideal) mitbewegten Teilchen.

In das Fluid eingebrachte Teilchen können auch innere Freiheitsgrade besitzen, die durch die Eigenschaften des umgebenden Geschwindigkeitsfelds angeregt werden können. Diese Teilchen können ihrerseits die Eigenschaften des Fluids beeinflussen und auf das Geschwindigkeitsfeld zurückwirken. Die Art und Stärke dieser Rückwirkung kann dabei stark vom Zustand der Teilchen abhängen.

In der vorliegenden Arbeit sollen im wesentlichen drei Aspekte dieser Wechselwirkung zwischen Geschwindigkeitsfeld und mitbewegten Teilchen untersucht werden. Dabei wird im folgenden meist von Polymeren gesprochen, hier vor allem im Sinne

von Teilchen, die in einer Strömung gestreckt werden und sich wie eine elastische Feder wieder zusammenziehen können. Diese *elastischen* Teilchen in einer *viskosen* Flüssigkeit bilden zusammen ein sogenanntes *viskoelastisches* Fluid.

Die Aspekte sind im einzelnen

- Arbeiten von Balkovsky et al. [2, 3] beschreiben eine Beziehung zwischen lokalen Streckungseigenschaften einer Strömung und den daraus resultierenden Verteilungen von Polymerlängen in dieser Strömung. Diese Beziehung soll am Beispiel einer stationären Strömung näher untersucht werden.
- Sogenannte elastische Instabilitäten in Strömungen, Instabilitäten, die auf die Elastizität von Fluidteilchen zurückgeführt werden, können in Systemen mit gekrümmten Stromlinien auftreten [54]. Statistische Eigenschaften der Krümmung von Trajektorien sollen in dieser Arbeit untersucht werden.
- Auch die Übergänge zwischen laminarem und turbulentem Zustand werden durch zugesetzte Polymere beeinflußt. Die Auswirkungen der Polymere sollen am Beispiel einer ebenen Scherströmung untersucht werden.

In der vorliegenden Arbeit werden einfache, niedrigdimensionale Modelle für Strömungen verwendet. Diese Modelle können nicht alle Details der Strömung abbilden, sondern sollen einige wichtige Eigenschaften modellieren. Gegenüber den vollen numerischen Simulationen haben diese Modelle aber den Vorteil, daß sie nur einen Bruchteil der Rechenzeit benötigen, und so die Möglichkeit bieten, Rechnungen für einen großen Parameterbereich in überschaubarer Zeit durchzuführen.

Im nächsten Abschnitt werden in knapper Form Grundlagen zur Navier-Stokes-Gleichung dargestellt. Im Abschnitt 1.3 folgt eine Beschreibung von einigen Phänomenen, die in Polymerlösungen auftreten und deutliche Abweichungen vom "normalen" Verhalten sogenannter newtonscher Fluide zeigen. Dem Einfluß von Polymeren wird durch einen zusätzlichen Term in der Navier-Stokes-Gleichung, den Polymerspannungstensor, Rechnung getragen. Die Erweiterung der Navier-Stokes-Gleichung um den Polymerspannungstensor und dessen Berechnung bildet den Rest dieses Abschnittes. Abschnitt 1.4 zeigt die Verbindungen zwischen den aus der nichtlinearen Dynamik bekannten Lyapunovexponenten und den Verteilungen von Polymerlängen in chaotischen und turbulenten Strömungen auf. Die Beschreibung von Krümmung und Torsion als lokale Eigenschaften der Trajektorien und deren Berechnung in Abschnitt 1.5 bilden den Abschluß dieses einleitenden Kapitels.

Im Kapitel 2 werden die Konzepte auf eine stationäre Strömung, eine modifizierte ABC-Strömung, angewandt. Die Eigenschaften dieses dynamischen Systems werden zunächst dargestellt. Dann stehen die Beziehungen zwischen Lyapunovexponenten und Polymerlängenverteilungen im Mittelpunkt. Es zeigt sich, daß auch lokalisierte Objekte – hier speziell Fixpunkte sowie periodische und heterokline Orbits – die

Eigenschaften der Längenverteilungen signifikant beeinflussen. Am Ende dieses Kapitels werden die Verteilungen der Krümmung von Trajektorien in dieser Strömung diskutiert.

Kapitel 3 beschreibt ein niedrigdimensionales Modell einer ebenen Scherströmung, das hier zu einer viskoelastischen Strömung erweitert wird. In den einzelnen Abschnitten dieses Kapitels werden dann die Auswirkungen der neu hinzugefügten Polymere auf die für den Turbulenzübergang wichtige nichtnormale Verstärkung, auf die Stabilität des laminaren Profils sowie auf die Lebensdauern der turbulenten Zustände untersucht. Auch wird hier noch einmal auf die Beziehung zwischen Lyapunovexponenten und Polymerlängenverteilungen und die Verteilungen der Krümmung von Trajektorien in dieser Strömung eingegangen.

Die Ergebnisse dieser Arbeit sind im Kapitel 4 noch einmal zusammenfassend dargestellt.

1.2. Grundlagen der Navier-Stokes-Gleichung

Als Gleichung, die das Verhalten eines strömenden Fluids beschreibt, ist die sogenannte Navier-Stokes-Gleichung allgemein anerkannt [50]. In diesem Abschnitt werden die wesentlichen Schritte zu ihrer Herleitung dargestellt (vgl. [43, 7, 5, 11, 15]).

1.2.1. Erhaltung der Masse

Die Zeitableitung einer Funktion $f(\mathbf{r}, t)$ abhängig von Ort \mathbf{r} und Zeit t an einem festen Ort ist

$$\left. \frac{\mathrm{df}}{\mathrm{dt}} \right|_{\mathbf{r}=\mathrm{const.}} = \frac{\mathrm{df}}{\mathrm{dt}} \,. \tag{1.2}$$

Bewegt sich der Beobachtungsort \mathbf{r} mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} , so ergibt sich die Beziehung

$$\left. \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{u}} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f \,. \tag{1.3}$$

Diese Ableitung wird als substantielle Ableitung bezeichnet.

Die Masse an Fluid der Dichte ρ , die ein festes, ruhendes Volumen V durch die Oberfläche verläßt, ist

$$\int_{\partial V} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \mathrm{d} \alpha \,. \tag{1.4}$$

Die Massenänderung läßt sich schreiben als

$$-\frac{\partial}{\partial t}\int \rho dV = -\int \frac{\partial}{\partial t}\rho dV. \qquad (1.5)$$

Das ergibt unter Anwendung des Gaußschen Integralsatzes

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V} \rho dV = -\int_{\partial V} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\alpha = -\int_{V} \operatorname{div}\left(\rho \mathbf{u}\right) dV, \qquad (1.6)$$

also

$$\int \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\rho \mathbf{u}\right)\right] d\mathbf{V} = \mathbf{0}.$$
(1.7)

Da diese Gleichung für beliebige Volumina gelten muß, muß der Integrand verschwinden, und wir erhalten die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\rho \mathbf{u} \right) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} + \mathbf{u} \operatorname{grad} \rho = 0.$$
 (1.8)

1.2.2. Zweites Newtonsches Axiom

Das zweite Newtonsche Axiom besagt, daß Kraft Impulsänderung ist. Wenn keine äußeren Kräfte wirken, ist die Kraft auf ein Fluidmassenelement δm durch den Druck gegeben:

$$\delta F_1 = -\frac{\partial p}{\partial x} \delta V$$
 $\delta F_2 = -\frac{\partial p}{\partial y} \delta V$ $\delta F_3 = -\frac{\partial p}{\partial z} \delta V$, (1.9)

also

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}(\delta m \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) = -\delta V \nabla p \,. \tag{1.10}$$

Wegen der Kontinuitätsgleichung bleibt die Masse des betrachteten Volumenelements konstant. So ergibt sich nach Division durch die Masse die Eulergleichung

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \,. \tag{1.11}$$

Für den Impuls eines Volumens gilt

$$\partial_t(\rho u_i) = u_i \partial_t \rho + \rho \partial_t u_i \tag{1.12}$$

Mit Euler- und Kontinuitätsgleichung ergibt sich¹

=

$$\partial_t(\rho u_i) = -u_i \partial_k \rho u_k - \rho u_k \partial_k u_i - \partial_i p$$
 (1.13a)

$$= -\partial_k [\delta_{ik} p + \rho u_i u_k]$$
(1.13b)

$$= -\partial_k \pi_{ik} \tag{1.13c}$$

¹Bei der Komponentenschreibweise von Vektoren und Tensoren gilt die Einsteinkonvention, d. h. über gleiche Indizes wird summiert. Die Summenkonvention gilt nicht bei den oberen Indices $^{(\nu)}$ in Kapitel 3.

mit dem Impulsflußtensor $\pi_{ik} = \delta_{ik}p + \rho u_i u_k$.

Zusammen mit der Kontinuitätsgleichung hat man vier Gleichungen für fünf Unbekannte (\mathbf{u} , ρ und p). Für die Beziehung zwischen Druck und Dichte muß eine thermodynamische Zustandsgleichung herangezogen werden.

Eine starke Vereinfachung des Problems erzielt man durch die Annahme von *Inkompressibilität* $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. In der Kontinuitätsgleichung bewirkt sie das Verschwinden der substantiellen Ableitung der Dichte, das heißt, die Dichte eines Fluidelements bleibt konstant.

1.2.3. Energie

Die kinetische Energie in einem Volumen Ω mit festen oder periodischen Randbedingungen und homogener Dichteverteilung ist

$$\int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 \right) d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \rho \|\mathbf{u}\|_2^2.$$
 (1.14)

Für ein inkompressibles Fluid ist die Änderung der kinetischen Energie

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \left(\frac{1}{2} \rho \| \mathbf{u} \|_{2}^{2} \right) = \rho \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \mathrm{d}\mathbf{r}$$
(1.15a)

$$= -\rho \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \left[\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\rho} \nabla p \right] d\mathbf{r}$$
 (1.15b)

$$= -\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \left(\rho \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 + p \right) d\mathbf{r}$$
 (1.15c)

$$= -\int_{\partial\Omega} \left(\frac{1}{2}\rho |\mathbf{u}|^2 + p\right) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, \mathrm{da} \qquad (1.15\mathrm{d})$$

Mit festen oder periodischen Randbedingungen verschwindet das Oberflächenintegral, somit bleibt die kinetische Energie erhalten.

Mit einer zusätzlichen äußeren Körperkraft f(x, t), gilt für die Energieänderung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \left(\frac{1}{2} \rho \| \mathbf{u} \|_2^2 \right) = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{f} \, \mathrm{d} \mathbf{r} \,. \tag{1.16}$$

Wenn das Kraftfeld konservativ ist, $\mathbf{f} = -\nabla \phi$, verschwindet die geleistete Arbeit. Das Potential kann mit dem Druck zusammengefaßt werden.

1.2.4. Viskosität, Navier-Stokes Gleichung

In viskosen Fluiden geht der Strömung Energie durch innere Reibung verloren und wird in Wärme umgesetzt. Dieser Energieverlust kann durch einen zusätzlichen Term im Impulsflußtensor beschrieben werden:

$$\pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho u_i u_k + \tau_{ik} \,. \tag{1.17}$$

 $\hat{\tau}$ ist der viskose Spannungstensor. Der Spannungstensor beschreibt den Teil des Impulsflusses, der nicht durch Mitbewegung geschieht.

Innere Reibung tritt auf, wenn benachbarte Fluidschichten sich mit unterschiedlicher Geschwindigkeit bewegen. $\hat{\tau}$ muß also aus räumlichen Ableitungen des Geschwindigkeitsfeldes bestehen. In gleichförmiger Bewegung $\mathbf{u} = \text{const. muß } \hat{\tau}$ ebenso verschwinden wie in gleichmäßiger Rotation. In gleichmäßiger Rotation verschwinden die symmetrisierten Geschwindigkeitsgradienten

$$\partial_i u_j + \partial_j u_i$$
, (1.18)

also darf der viskose Spannungstensor nur diese symmetrischen Kombinationen enthalten. Die allgemeinste Form mit ersten Ableitungen ist dann

$$\tau_{ik} = -\eta \left(\partial_k u_i + \partial_i u_k - \frac{2}{3} \delta_{ik} \partial_j u_j \right) - \tilde{\eta} \delta_{ik} \partial_j u_j$$
(1.19)

mit den beiden dynamischen Viskositäten η und $\tilde{\eta}$. Damit erhalten wir

$$\rho\left(\partial_{t}u_{i}+u_{k}\partial_{k}u_{i}\right)=-\partial_{i}p+\partial_{k}\left[\eta\left(\partial_{k}u_{i}+\partial_{i}u_{k}-\frac{2}{3}\delta_{ik}\partial_{j}u_{j}\right)\right]+\partial_{i}\left(\tilde{\eta}\partial_{j}u_{j}\right).$$
(1.20)

Unter der Annahme konstanter Viskositäten erhält man die Navier-Stokes Gleichungen

$$\rho\left(\partial_{t}u_{i}+u_{k}\partial_{k}u_{i}\right)=-\partial_{i}p+\eta\partial_{kk}u_{i}+\left(\tilde{\eta}+\frac{1}{3}\eta\right)\partial_{ik}u_{k}.$$
(1.21)

Eine wesentliche Vereinfachung erhält man, wenn man Divergenzfreiheit annimmt

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$
 (1.22a)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \mathbf{0}. \tag{1.22b}$$

 ν ist hier die kinematische Viskosität. Sie geht aus der dynamischen Viskosität durch Division durch die Dichte hervor: $\nu = \eta/\rho$. Die zweite dynamische Viskosität $\tilde{\eta}$ verschwindet für ideale, einatomige Gase, und für inkompressible Strömungen verschwindet der Term, der $\tilde{\eta}$ enthält. $\tilde{\eta}$ wird im folgenden nicht mehr auftreten. Eventuelle äußere Kräfte **f** können auf der rechten Seite von (1.22a) addiert werden.

Durch Übergang zu dimensionslosen Größen

$$t' = \frac{tu_0}{l_0}, \quad \mathbf{r}' = \frac{\mathbf{r}}{l_0}, \quad \mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{u_0}, \quad p' = \frac{p}{\rho u_0^2}, \quad \frac{1}{Re} = \frac{\nu}{l_0 u_0}, \quad \mathbf{f}' = \frac{\mathbf{f}}{\rho} \frac{l_0}{u_0^2}$$
 (1.23)

erhält man die dimensionslose Navier-Stokes Gleichung

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla \mathbf{p} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}.$$
 (1.24)

Die dabei eingeführte dimensionslose Reynoldszahl Re ist ein Maß für die Dämpfung der Bewegung. Mit der Navier-Stokes-Gleichung lassen sich Strömungen von Flüssigkeiten mit kleinen Molekülgewichten und Gasen beschreiben, sofern die Geschwindigkeiten klein gegenüber der Schallgeschwindigkeit sind. Eine Gleichung, die wie (1.19) dem Spannungstensor einen Ausdruck zuweist, nennt man *konstitutive Gleichung*. (1.19) mit konstanten Viskositäten ist die konstitutive Gleichung für ein newtonsches Fluid. Das wesentliche am newtonschen Fluid ist, daß im inkompressiblen Fall eine lineare Beziehung zwischen dem viskosen Spannungstensor und dem Scherratentensor besteht.

1.2.5. Voll entwickelte Turbulenz

Die sehr komplexe Strömungsform bei hohen Reynoldszahlen wird *voll entwickelte Turbulenz* genannt [43, 15, 21]. Typisch ist hier eine extrem irreguläre zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit an jedem Punkt. Ähnlich irregulär sind auch die Variationen der Geschwindigkeit zwischen unterschiedlichen Orten. Die über die Zeit gemittelte Geschwindigkeit **u** ändert sich aber glatt mit dem Beobachtungsort. Man zerlegt die aktuelle Geschwindigkeit **v** in die mittlere Geschwindigkeit und Fluktuation **v**'

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u} \,. \tag{1.25}$$

Den fluktuierenden Teil kann man als Überlagerung unterschiedlich großer Wirbel ansehen. Mit steigender Reynoldszahl entstehen zunächst die großen Wirbel, deren Ausdehnung von der Größenordnung des Strömungsgebietes ist. Dann folgen kleinere Wirbel. In der voll entwickelten Turbulenz sind Wirbel jeder Größe zwischen der kleinsten vorhandenen Größe und den Abmessungen des Strömungsgebietes vorhanden.

Die obere Grenze der Wirbelausdehnung nennt man auch die fundamentale oder externe Größenordnung l. Die Geschwindigkeit der größten Wirbel ist von der Größenordnung der Variation der mittleren Geschwindigkeit über die Länge l, Δu . Die Frequenzen sind vergleichbar mit u/l.

Die kleineren Wirbel wirken wie eine kleinskalige Variation der großen Wirbel. Sie haben kleinere Amplituden, und in ihnen ist nur ein kleiner Teil der gesamten kinetischen Energie enthalten.

Für die verschiedenen Größenordnungen kann man jeweils eine lokale Reynoldszahl Re $_{\lambda}$ definieren:

$$\operatorname{Re}_{\lambda} = \frac{u_{\lambda}\lambda}{\nu} \,. \tag{1.26}$$

Große Wirbel haben große lokale Reynoldszahlen und erfahren damit effektiv nur eine schwache viskose Dämpfung, während kleine Wirbel mit kleinen lokalen Reynoldszahlen stärker gedämpft werden. Auf großen Skalen gibt es also keine nennenswerte Energiedissipation. Bei kleinen Skalen, wenn Re_{λ} von der Ordnung 1 ist, wirkt sich die Viskosität stark aus. Diese Wirbel sind von der Größenordnung λ_0 . Der Transport

der Energie von den großen zu den kleinen Skalen geschieht über die Nichtlinearität der Navier-Stokes-Gleichung, $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$. Anhand der Reynoldszahl kann man die Grenzen von viskos dominiertem und nichtlinear dominiertem Bereich abschätzen.

Das Verhalten der Strömung auf den großen Skalen hängt zwar kaum von der Viskosität ab. Die Dissipation wird aber dadurch bestimmt, wieviel Energie von den großen Skalen geliefert wird. Aus den großskaligen Größen ρ , l und Δu kann man auf nur eine Weise eine Größe mit der Dimension der Energiedissipation pro Zeit und Masse $[\varepsilon] = L^2/T^3$ bekommen:

$$\epsilon \propto \frac{(\Delta u)^3}{l}.$$
 (1.27)

Diese Größe bestimmt die Größenordnung der Energiedissipation in der turbulenten Strömung.

Die Variation des Druckes ist von der Größenordnung

$$\Delta p \propto \rho(\Delta u)^2. \tag{1.28}$$

Lokale Eigenschaften auf den Skalen $l \gg \lambda \gg \lambda_0$ können nur von ρ und ε bestimmt sein. Die turbulente Geschwindigkeitsvariation über eine Distanz λ ist damit (Kolmogorov, Obukhov [40, 51])

$$\mathfrak{u}_{\lambda} \propto (\epsilon \lambda)^{1/3}$$
. (1.29)

Dabei wird angenommen, daß die Variation der mittleren Geschwindigkeit über die Distanz λ vernachlässigbar klein gegen u_{λ} ist. Die Variation der Geschwindigkeit an einem festen Ort in einem Zeitintervall τ (klein gegenüber T = l/u) kann man mit der gleichen Annahme als

$$u_{\tau} = (\epsilon \tau u)^{1/3} \tag{1.30}$$

abschätzen. Ein Fluidelement legt in der Zeit τ etwa einen Weg τu zurück. Die Gleichung gibt also die Geschwindigkeitsvariation zwischen dem Fluidelement, das sich zu einem Zeitpunkt t an einem Ort **x** befindet, und dem Fluidelement, das sich zum Zeitpunkt t + τ an diesem Ort befindet.

Die Variation der Geschwindigkeit eines Fluidelements auf seinem Weg, u_{τ} kann nur von ε und τ abhängen, also

$$\mathfrak{u}_{\tau}' = (\varepsilon \tau)^{1/2}. \tag{1.31}$$

Für kleine τ ist dies deutlich kleiner als u_{τ} . Diese Abschätzung wurde auch bei (1.30) benutzt.

Mit (1.27) erhält man

$$u_{\lambda} \propto \Delta u (\lambda/l)^{1/3}$$
 (1.32a)

$$u_{\tau} \propto \Delta u (\tau/T)^{1/3}$$
 (1.32b)

Zeitliche und räumliche Variationen skalieren also gleich. Die lokale Reynoldszahl wird damit

$$\operatorname{Re}_{\lambda} = \frac{\Delta u \lambda^{4/3}}{\nu l^{1/3}} = \operatorname{Re}\left(\frac{\lambda}{l}\right)^{4/3}$$
(1.33)

Bei der Wirbelgröße λ_0 , bei der Re $_{\lambda_0}$ von der Größenordnung 1 ist, wird die kinetische Energie in Wärme umgesetzt. Es gilt

$$\lambda_0 \propto \frac{l}{\mathrm{Re}^{3/4}}\,.\tag{1.34}$$

 λ_0 ist die einzige Größe mit der Dimension einer Länge, die aus ε und ν gebildet werden kann

$$\lambda_0 \propto \left(\frac{\gamma^3}{\epsilon}\right)^{1/4}.$$
 (1.35)

Der Bereich der Wirbelgrößen von der Ordnung l ist der *Energiebereich*, der *Dissipationsbereich* ist der Bereich mit Wirbelgrößen von etwa λ_0 . Bei genügend hohen Reynoldszahlen gibt es dazwischen den sogenannten *Inertialbereich*.

Das Energiespektrum im Spektralraum hat im Inertialbereich die Form (Kolmogorov-Obukhov [40, 51])

$$E(k) = e^{2/3} k^{-5/3} \,. \tag{1.36}$$

Der Energietransport in diesem Inertialbereich wird durch

$$\epsilon = \nu \frac{\left\langle \|\nabla \mathbf{u}\|_2^2 \right\rangle}{L^3} \tag{1.37}$$

beschrieben.

Eine andere kleine Längenskala, die Taylorlänge ist durch die mittlere quadratische Breite des Energiespektrums definiert

$$\lambda_{\mathrm{T}}^{-2} \propto \frac{\left\langle \|\nabla \mathbf{u}\|_{2}^{2} \right\rangle}{\left\langle \|\mathbf{u}\|_{2}^{2} \right\rangle} = \frac{\left\langle \|\boldsymbol{\omega}\| \right\rangle_{2}^{2}}{\left\langle \|\mathbf{u}\|_{2}^{2} \right\rangle}.$$
(1.38)

In Skalen größer als diese Länge ist ein signifikanter Anteil kinetischer Energie enthalten. [43, 15, 21]

1.3. Viskoelastische Strömungen

Der Begriff viskoelastisch ist zusammengesetzt aus viskos und elastisch. Die Begriffe werden hier anhand der Hooke- und Newton-Körper kurz dargestellt [33].

Wir stellen uns zwei parallele Platten in einem Abstand h mit einem Material dazwischen vor. Auf die obere der Platten wirke eine Kraft **F** parallel zu den Platten. Die untere Platte bleibe in ihrer Position. Das Material zwischen den Platten rutsche nicht an den Platten.

Hooke-Körper

Die obere Platte wird durch die Kraft um eine Strecke x bewegt, und das Material zwischen den Platten wird deformiert. Der Grad der Scherung (degree of shear), die Verzerrung (strain), ist

$$\gamma = \frac{x}{h} = \frac{dx}{dy}.$$
 (1.39)

Die für eine Verzerrung benötigte Kraft ist proportional zur Fläche. Die Scherspannung (shear stress) ist

$$\tau = \frac{F}{A} \,. \tag{1.40}$$

Wenn die Verzerrung bei konstanter Scherspannung sofort konstant wird, spricht man bei dem Material zwischen den Platten von einem *elastischen* Festkörper, einem *Hooke-Körper*. Wird $\hat{\gamma}$ erst asymptotisch für große Zeiten konstant spricht man von einem viskoelastischen Festkörper. Das Hooke'sche Gesetz für Festkörper lautet (verallgemeinert auf tensorielle Größen)

$$\hat{\tau} = G\hat{\gamma} \tag{1.41}$$

mit dem Elastizitätsmodul G.

Newton-Körper

Befindet sich zwischen den Platten eine Flüssigkeit, wird die Scherverzerrung nicht konstant. Vielmehr wird die Verzerrungsrate

$$\dot{\gamma} = \frac{\dot{x}}{h} = \frac{d\dot{x}}{dy} \tag{1.42}$$

konstant. In der reinen Scherströmung verschieben sich die Flüssigkeitsschichten ohne Dehnung gegeneinander. Wenn für konstante Scherspannung $\hat{\gamma}$ sofort konstant wird nennt man es ein rein *viskoses* Fluid oder einen *Newton-Körper*. Wird sie erst asymptotisch für große Zeiten konstant, so spricht man von einem viskoelastischen Fluid. Für newtonsche Fluide gilt

$$\hat{\tau} = \eta \hat{\dot{\gamma}} \tag{1.43}$$

mit der dynamischen Scherviskosität n.

Nicht-newtonsche Fluide wie zum Beispiel verdünnte Polymerlösungen zeigen zum Teil deutlich unterschiedliches Verhalten. Wesentlich ist hierbei, daß die Viskosität nicht konstant ist, sondern von der Scherung abhängig sein kann.

1.3.1. Auswirkungen von Polymeren auf Strömungen

Polymermoleküle können durch Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung aus ihrer Gleichgewichtskonformation gebracht werden. Dabei nehmen sie Energie auf, die sie wieder an die Strömung abgeben können. Das kann auf sehr unterschiedlichen Zeitskalen passieren, wodurch interessante Effekte auftreten können, die sich deutlich vom Verhalten "normaler", newtonscher Flüssigkeiten unterscheiden.

Scherverdünnung und -verdickung

Die Navier-Stokes-Gleichung beschreibt das Verhalten von sogenannten viskosen Fluiden, von Fluiden, die innere Reibung zeigen. Der viskose Spannungstensor, der diese Reibung beschreibt, ist proportional zur Scherrate. Die Proportionalitätskonstante ist die Viskosität. Bei newtonschen Fluiden ist diese Viskosität unabhängig von der Scherrate. Bei Polymerlösungen ist das in vielen Fällen nicht mehr der Fall. Die Viskosität nimmt mit der Scherrate zu (Scherverdickung, Dilatanz) oder, was viel häufiger der Fall ist, ab (Scherverdünnung, Pseudoplastizität). Die Viskosität kann sich dabei um einen Faktor von bis zu 10³ oder 10⁴ ändern [5].

Daneben gibt es noch andere Effekte wie das Emporkriechen von Fluid an einem rotierenden Stab [24] oder die deutliche Verbreiterung eines aus einem dünnen Rohr austretenden Strahls, die durch zusätzliche, durch die Polymere hervorgerufene Spannungen erklärt werden können. Dabei stellt man sich vor, daß die Polymermoleküle wie Gummibänder entlang der Strömungslinien wirken [76].

Ein weiterer Effekt ist die Wirbelunterdrückung [25]. Wenn Flüssigkeit aus einem großen Behälter durch eine kleine Öffnung ausfließt (z.B. Badewanne), bildet sich oft ein Wirbelfaden, in dem Luft vom Ausfluß bis zur Flüssigkeitsoberfläche fließt. Zugabe von geringen Mengen an bestimmten Polymeren (Polyethylenoxid (PEO), Polyacrylamid (PAM)) führt zum Verschwinden des Wirbelfadens und zu einer deutlich größeren Ausflußgeschwindigkeit. Dabei stellt man sich vor, daß die Polymermoleküle, die sich in einer Grenzschicht am Behälterboden auf die Öffnung zubewegen, nahezu vollständig gestreckt werden und dann in der Nähe der Öffnung eine zusätzliche Spannung entlang der Strömungslinien bewirken. Die Polymere, die eine effektive Wirbelunterdrückung bewirken, eignen sich auch gut zur turbulenten Widerstandsreduktion, die im nächsten Abschnitt näher beschrieben wird.

Turbulente Widerstandsreduktion

Der Strömungswiderstand W ist die Kraft, die ein Körper mit der Fläche S einer Strömung entgegenbringt. ρ ist dabei die Dichte des Fluids, u ist die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen dem Körper und der Strömung und f der Widerstandsbeiwert (oft auch als c_W-Wert bezeichnet).

$$W = \frac{1}{2}\rho u^2 fS. \qquad (1.44)$$



Abbildung 1.1: Demonstration der turbulenten Widerstandsreduktion. Durch zwei baugleiche Schläuche wird Wasser (rechts) und Wasser mit Polymerzusatz (links) verspritzt. Aufgrund des reduzierten Strömungswiderstands des Wassers mit Polymerzusatz ist die Reichweite deutlich größer.

Bei einer Strömung durch ein Rohr mit dem Durchmesser D kompensiert der Strömungswiderstand im Gleichgewicht gerade die antreibende Kraft, also

$$W = (p_0 - p_L) \frac{D^2}{4} \pi$$
 (1.45)

mit der Druckdifferenz $(p_0 - p_L)$ über die Länge des Rohres L. Als Geschwindigkeitsdifferenz nehmen wir die mittlere Strömungsgeschwindigkeit $\langle u \rangle$. Die entgegenstehende Fläche ist die Wand des Rohres mit der Fläche S = D π L. Damit ergibt sich als Wert für den Widerstandsbeiwert

$$f = \frac{1}{4} \left(\frac{D}{L} \right) \frac{p_0 - p_L}{\frac{1}{2}\rho \langle u \rangle^2}.$$
 (1.46)

Der Widerstandsbeiwert ist abhängig von der Reynoldszahl, die hier mit der dynamischen Viskosität η definiert ist als

$$\operatorname{Re} = \mathcal{D} \langle \mathfrak{u} \rangle \,\rho/\eta \,. \tag{1.47}$$

In laminarer Strömung ist f(Re) = 16/Re nahezu unabhängig von der zugesetzten Polymerkonzentration. Im newtonschen turbulenten Fall ist f nahezu konstant. Prandtl gibt hier als Abhängigkeit [59]

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 2.0 \log \left(\text{Re}\sqrt{f} \right) - 0.8 \tag{1.48}$$

an. Bei zunehmender Polymerkonzentration im turbulenten Fall fällt der Widerstand deutlich ab. [72, 74, 5, 33, 67].

1.3. Viskoelastische Strömungen



Abbildung 1.2: Einige Beispiele für transiente Konformationen von Polymeren nach [64]. a) halbe Hantel, b) gefaltet, c) Hantel, d) geknotet.

1.3.2. Polymere

Polymere sind große Moleküle, die aus kleineren Einheiten (*Monomeren*) zusammengesetzt sind. Das können immer gleiche Einheiten (*Homopolymer*) oder auch mehrere unterschiedliche Einheiten (*Copolymer*) sein. Bei den sogenannten *linearen* Polymeren sind im Gegensatz zu *verzweigten* Polymeren alle Einheiten in einer Kette angeordnet. Die Verbindungen zwischen den einzelnen Monomeren sind meist beweglich, so daß es sehr viele mögliche Gestalten eines einzelnen Polymers geben kann. Durch thermische Bewegung wird sich die Konformation des Moleküls ständig ändern. Diese Vielzahl der möglichen Konformationen führt bei langen Molekülketten zu einer entropischen Kraft, die das Polymer auf eine Knäuelstruktur zusammenzieht.

Die besonderen Fähigkeiten der Polymere, die umgebende Stömung zu beeinflussen, können in vielen Fällen ihrer elastischen Verformbarkeit zugeschrieben werden. Experimente [64] zeigen eine große Vielfalt von transienten Polymerkonformationen die an Hanteln oder halbe Hanteln erinnern, einen Knoten mit zwei losen Enden oder eine gefaltete Struktur zeigen (s. Abb. 1.2). Die verschiedenen Konformationen zeigen unterschiedliches Verhalten bei Streckung und Relaxation. So erreichen in stark streckendem Fluß die geknoteten Moleküle ihre maximale Länge am schnellsten, gefolgt von halben Hanteln und Hanteln. Die gefalteten wurden am langsamsten gestreckt.

Wir beschränken uns hier auf das einfache Modell der elastischen Hantel (s. Abb. 1.3). Als Länge des Polymermoleküls nehmen wir den Abstand der Enden des Moleküls an

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_a \,. \tag{1.49}$$

Das Polymer verhält sich also wie eine elastische Hantel: zwei Perlen, die durch eine Feder verbunden sind. Die Perlen stellt man sich bei flexiblen Polymeren als Knäu-



Abbildung 1.3: Links: Schematische Darstellung einer Polymerkette mit den einzelnen Bausteinen und den bei fester Länge drehbaren Verbindungen. Als Länge wird der Abstand zwischen den beiden Endpunkten der Kette angenommen. Rechts: Schematische Darstellung der elastischen Hantel. Zwei Perlen sind durch eine Feder verbunden. Als Polymerlänge wird die Länge der Feder angenommen.

el aus etwa zehn bis zwanzig Monomeren vor². Die Verbindung zwischen den Perlen ist eine lange Monomerkette. Die Verbindungen zwischen den einzelnen Monomeren können mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit in unterschiedliche Richtungen umklappen. Die wahrscheinlichste Länge der Feder ist dann die, für die es die meisten Realisationen gibt. Das Polymer relaxiert auf diese Länge durch eine entropische Kraft, die als harmonisch angenommen wird [56, 16, 53]

$$\mathbf{F} = \mathbf{H}\mathbf{R} \,. \tag{1.50}$$

Die Federkonstante skaliert dabei nach dem Florygesetz

$$H = \frac{3kT}{R_F^2}$$
(1.51)

mit der Boltzmannkonstanten k, der Temperatur T und dem Flory-Radius

$$R_F \approx N^{\nu} a. \tag{1.52}$$

N ist dabei die Zahl der Monomere, a die Länge eines einzelnen Monomers und ν der Floryexponent. Im Dreidimensionalen gilt $\nu = 3/5$. Der Floryradius ist der Radius des Polymerknäuels im Gleichgewichtszustand ohne äußere Kräfte. Für ein ideales Knäuel gilt $\nu = 1/2$, der Wert 3/5 beinhaltet die Korrektur zum Radius einer idealen Kette bei der das Volumen der Monomere mit einbezogen ist. Wird die Kette zunehmend gestreckt, so nimmt der Volumeneffekt ab, und ein Übergang zum Exponenten der idealen Kette $\nu = 1/2$ tritt auf. Die Federkonstante ist also genaugenommen abhängig von der aktuellen Länge der Kette und die Kraft nicht harmonisch. Dieser Effekt wird hier aber nicht berücksichtigt.

²Polymere mit steifen Verbindungen zwischen den Monomeren erscheinen erst auf größeren Längenskalen flexibel. Die Skala, die das beschreibt, ist die Persistenzlänge, die Abfallkonstante der Orientierungskorrelation.

1.3.3. Polymerspannungstensor

Die Polymere in einer Polymerlösung bewirken einen zusätzlichen Beitrag zum Spannungstensor, der als additiv angenommen wird [5]

$$\hat{\tau} = \hat{\pi}_{\rm s} + \hat{\pi}_{\rm p} \tag{1.53a}$$

$$= p_s \hat{\delta} + \hat{\tau}_s + p_p \hat{\delta} + \hat{\tau}_p \qquad (1.53b)$$

$$= p\hat{\delta} + \hat{\tau}. \tag{1.53c}$$

 $p = p_s + p_p$, $\hat{\tau} = \hat{\tau}_s + \hat{\tau}_p = \eta_s \hat{\gamma} + \hat{\tau}_p$, η_s ist die Viskosität des Lösungsmittels, $\hat{\gamma} = \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^{\dagger}$ der Scherratentensor.

In dem Perlen-Feder-Modell trägt zum einen die Federkraft, zum anderen die Bewegung der Perlen zum Spannungstensor bei. Die Position der Perlen sei durch \mathbf{r}_{ν} gegeben, die Länge der Feder ist dann $\mathbf{R} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$.

Die Federn von Polymeren, die eine mit dem Fluid bewegte Fläche S mit dem Normalenvektor **n** durchdringen, üben auf die Fläche eine Kraft aus. Die Kraft ist proportional zur Anzahldichte der Polymere n. Die Polymere müssen die Fläche durchdringen, das heißt, sie müssen sich in einem Volumen $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{R})$ S befinden, wenn die momentane Länge R beträgt. Die Verteilung der Polymerlängen und -orientierungen **R** ist durch das Wahrscheinlichkeitsmaß P(**R**) gegeben. Die Kraft auf die Fläche ist dann

$$\int -n(\mathbf{n} \cdot \mathbf{R}) \mathbf{F} d\mathbf{P}(\mathbf{R}) = \mathbf{n} \cdot \hat{\pi}_{p}. \qquad (1.54)$$

Der Federanteil des Polymerspannungstensors ist damit

$$\hat{\pi}_{p}^{(f)} = -n \int \mathbf{R} \mathbf{F} dP(\mathbf{R}) = -n \langle \mathbf{R} \mathbf{F} \rangle . \qquad (1.55)$$

Mit dem Hookeschen Gesetz wird daraus bei einer Federkonstanten H

$$\hat{\pi}_{\mathrm{p}}^{(\mathrm{f})} = -\mathrm{n}\mathrm{H}\left\langle \mathbf{R}\mathbf{R}\right\rangle \,. \tag{1.56}$$

Die Perlen tragen zum Spannungstensor bei, indem sie beim Durchgang durch eine Fläche ihren Impuls von der einen auf die andere Seite der Fläche transportieren. Eine Perle mit der Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{r}}$ kann S in der Zeit Δt durchdringen, wenn sie sich im Volumen $\Delta t(\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{u}) \cdot S\mathbf{n}$ befindet. Die Zahl der Perlen, die die mit der Strömung bewegte Fläche S in der Zeit Δt durchdringen, ist damit

$$n((\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{S}\mathbf{n})\Delta t.$$
(1.57)

Die Perlen haben eine Masse m und transportieren beim Durchgang durch die Flächen einen Impuls

$$\mathfrak{n}((\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{S}\mathbf{n})\mathfrak{m}(\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{u})\Delta t. \qquad (1.58)$$

Jedes Molekül hat zwei Perlen (v = 1, 2). Durch Mittelung über alle Polymerkonformationen (P(**R**)) ergibt sich der durchschnittliche Impulsfluß pro Fläche und Zeiteinheit

$$\mathbf{n}\mathbf{n}\cdot\int\left[\sum_{\nu}\mathbf{m}(\dot{\mathbf{r}}_{\nu}-\mathbf{u})(\dot{\mathbf{r}}_{\nu}-\mathbf{u})\right]d\mathbf{P}(\mathbf{R})=\mathbf{n}\cdot\hat{\pi}_{\mathrm{p}}^{(\mathrm{p})}.$$
(1.59)

 $\hat{\pi}_p^{(p)}$ ist noch abhängig von der Geschwindigkeitsverteilung der Perlen. Unter der Annahme einer Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilung

$$\Xi(\dot{\mathbf{r}}_{1}, \dot{\mathbf{r}}_{2}) = \frac{\exp\left(-\left[\frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{r}}_{1} - \mathbf{v})^{2} + \frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{r}}_{2} - \mathbf{v})^{2}\right]/kT\right)}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\left[\frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{r}}_{1} - \mathbf{v})^{2} + \frac{1}{2}m(\dot{\mathbf{r}}_{2} - \mathbf{v})^{2}\right]/kT\right)d\dot{\mathbf{r}}_{1}d\dot{\mathbf{r}}_{2}} \quad (1.60)$$

ergibt sich nach Integration über den Geschwindigkeitsraum für den Perlenanteil des Spannungstensors

$$\hat{\pi}_{p}^{(p)} = 2nkT\hat{\delta}. \qquad (1.61)$$

Der gesamte Polymerspannungstensor ist damit

$$\hat{\pi}_{p} = \hat{\pi}_{p}^{(f)} + \hat{\pi}_{p}^{(p)} = -nH \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle + 2nkT\hat{\delta}.$$
(1.62)

Die Gleichgewichtskonformation des Polymers folgt aus dem Gleichverteilungssatz der statistischen Mechanik

$$\langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle_{\rm eq} = \frac{\mathrm{k\,I}}{\mathrm{H}} \hat{\delta} \,.$$
 (1.63)

Mit dem Ausdruck aus (1.51) für die Federkonstante erhält man als Gleichgewichtslänge des Polymers wieder den Floryradius

$$\|\mathbf{R}\|_{eq} = \sqrt{\operatorname{Tr} \langle \mathbf{R} \mathbf{R} \rangle_{eq}} = \sqrt{k T \frac{R_{F}^{2}}{3kT} \operatorname{Tr} \hat{\delta}} = R_{F}.$$
(1.64)

Man erhält $\hat{\tau}_p$, indem man den Gleichgewichtswert von $\hat{\pi}_p$, $\hat{\pi}_p^{(eq)} = nkT\hat{\delta}$, subtrahiert:

$$\hat{\tau}_{p} = \hat{\pi}_{p} - \hat{\pi}_{p}^{(eq)} = -nH \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle + nkT\hat{\delta}.$$
(1.65)

Konformationstensor

Im obigen Ausdruck für den Polymerspannungstensor taucht der sogenannte Konformationstensor auf. Der Konformationstensor $\hat{c} = \langle \mathbf{RR} \rangle$ ist der Erwartungswert des dyadischen Produkts **RR** mit der Polymerlänge **R**. Das dyadische Produkt ist symmetrisch und enthält auf der Hauptdiagonalen die Quadrate der Komponenten. Die Spur gibt also das Quadrat der Polymerlänge an. Auf den anderen Positionen stehen die Produkte der einzelnen Komponenten. Bei der Produktbildung geht die Information über das Vorzeichen des Vektors verloren, diese Information ist in diesem Zusammenhang aber auch unerheblich. Der Vektor läßt sich aus drei Elementen des dyadischen Produkts, die mindestens zwei Nichtdiagonalelemente enthalten, bis auf das Vorzeichen rekonstruieren. Die Mittelung $\langle . \rangle$ zum Konformationstensor erfolgt über die thermischen Fluktuationen. Auf der Hauptdiagonalen des Konformationatensors stehen also die Erwartungswerte der Quadrate der Komponenten, die anderen Einträge enthalten die Erwartungswerte der Produkte der Komponenten. Bei unkorrelierten Komponenten sind das die Produkte der Erwartungswerte der Komponenten. Der Erwartungswert der Länge ist die Wurzel der Spur

$$\langle \|\mathbf{R}\|_2 \rangle = \sqrt{\mathrm{tr}\hat{\mathbf{c}}} \,. \tag{1.66}$$

1.3.4. Zeitliche Entwicklung des Polymerspannungstensors

Bringt man Polymermoleküle in eine Flüssigkeitsströmung, so werden die Elemente eines Polymers von der Strömung mitgeführt, wobei im allgemeinen jedes Element eine unterschiedliche lokale Geschwindigkeit erfährt, während die Abstände zwischen benachbarten Monomeren im wesentlichen konstant bleiben. Geht man davon aus, daß die Ausdehnung des Moleküls klein gegenüber den kleinsten Strukturen des Geschwindigkeitsfeldes ist, so wird man das Geschwindigkeitsfeld linearisiert betrachten,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_1) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_2) \approx (\nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}_1))^{\dagger} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$$
 (1.67a)

$$u_i(\mathbf{r}_1) - u_i(\mathbf{r}_2) \approx (\partial_k u_i(\mathbf{r}_1))(r_{2,k} - r_{1,k}).$$
 (1.67b)

Daraus ergibt sich im allgemeinen eine Verformung des Moleküls.

Die harmonische Kraft (1.50) führt zu einer Relaxation der Polymerlänge mit einer gewissen Zeitkonstanten $2\lambda_{H}$.³ Zusammen ergibt dies eine Bewegungsgleichung für die Polymerlänge

$$\partial_t \mathbf{R} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{R} = \left((\nabla \mathbf{u})^\dagger - \frac{1}{2\lambda_H} \hat{\delta} \right) \cdot \mathbf{R}$$
 (1.68)

Je nach dem, ob Streckung oder Relaxation überwiegen, strebt die Polymerlänge gegen unendlich oder null. Beide Fälle sind unphysikalisch.

Eine Möglichkeit, um Abhilfe zu schaffen, ist die Einführung eines Diffusionsterms

$$\partial_{t}\mathbf{R} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{R} = \left((\nabla \mathbf{u})^{\dagger} - \frac{1}{2\lambda_{H}}\hat{\delta}\right) \cdot \mathbf{R} + \kappa \nabla^{2}\mathbf{R}.$$
(1.69)

Dieses ist das sogenannte uniaxiale Modell, das hier aber nicht weiter verwendet wird.

Eine andere Möglichkeit, um stabile Lösungen zu erhalten, ist die Addition von weißem Rauschen $d\mathbf{B}(t)$

$$\mathbf{d}\mathbf{R} = \left((\nabla \mathbf{u})^{\dagger} - \frac{1}{2\lambda_{\mathrm{H}}} \hat{\delta} \right) \cdot \mathbf{R} \mathbf{d}\mathbf{t} + \sigma \mathbf{d}\mathbf{B}(\mathbf{t}) \,. \tag{1.70}$$

³Der Faktor 2 wird in der Zeitkonstanten für die Polymerlänge eingeführt. Beim Übergang zum Konformationstensor (1.79) verschwindet dieser Faktor und man erhält als Relaxationszeit für den Konformationstensor λ_{H} .

μ	σ	
0	const.	$r_0 + \sigma B(t)$
const. $\neq 0$	0	$r_0 \exp(\mu(t-t_0))$
const. < 0	const.	$r_0 \exp(\mu(t-t_0)) + \int_{t_1}^t \exp(\mu(t-t'))\sigma\xi(t')dt'$
flukt.	0	$r_0 \exp(\int_{t_0}^t \mu(t') dt')$

Tabelle 1.1: Spezialfälle der Lösungen für R(t), (1.75).

Das verhindert, daß die Länge bei stärkerer Relaxation gegen null strebt. Um eine Lösung für die Polymerlänge $R = ||\mathbf{R}||$ zu erhalten multiplizieren wir die Gleichung mit \mathbf{R}/R und setzen

$$\kappa(t) = \mathbf{R}(t)(\nabla \mathbf{u}(t))^{\dagger} \mathbf{R}(t) / R^{2}(t) \quad \text{und} \quad \mu(t) = \kappa(t) - 1/(2\lambda_{H}). \quad (1.71)$$

Wir multiplizieren die Gleichung mit $\exp\left(-\int_0^t \mu(s) ds\right)$.

$$\exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right]dR(t) = \exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right](\mu(t)R(t)dt + \sigma dB(t)) \quad (1.72)$$

$$d\left(\exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right]R(t)\right) = \exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right](dR(t)-\mu(t)R(t)dt)$$
$$= \exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right]\sigma dB(t)$$
(1.73)

Nach Integration und partieller Integration

$$\exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right]R(t) - R(0) = \int_{0}^{t}\exp\left[-\int_{0}^{t'}\mu(s)ds\right]\sigma dB(t')$$
$$= \exp\left[-\int_{0}^{t}\mu(s)ds\right]\sigma B(t) + \int_{0}^{t}\mu(t')\exp\left[-\int_{0}^{t'}\mu(s)ds\right]\sigma B(t')dt'$$

ergibt sich schließlich

$$R(t) = R(0) \exp\left[\int_0^t \mu(s) ds\right] + \sigma B(t) + \int_0^t \mu(t') \exp\left[\int_{t'}^t \mu(s) ds\right] \sigma B(t') dt'.$$
(1.75)

In Tabelle 1.1 sind einige Spezialfälle der Lösungen von (1.75) angegeben. Für $\tilde{\mu}(t) = \mu(t) - 1/\lambda = 0$ ergibt sich ein Wienerprozeß mit Erwartungswert r_0 und Varianz σ^2 . Falls $\sigma = 0$ gilt, beschreibt die Lösung einen exponentiellen Zerfall oder exponentielles Wachstum. Für $\tilde{\mu} < 0$ ergibt sich ein Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß. Wenn

die Verteilung der $\tilde{\mu}(t)$ dem zentralen Grenzwertsatz genügt, ergibt sich mit $\sigma = 0$ ein lognormalverteiltes R, für $\sigma \neq 0$ genügt die Verteilung asymptotisch einem Potenzgesetz.

Die Ito-Formel (1.78) [36, 23, 38, 52] erlaubt die Transformation der stochastischen Differentialgleichung (1.70) zu einer Differentialgleichung für den Konformationstensor, die dem Oldroyd-B-Modell entspricht.

Oldroyd-B Modell

Das Oldroyd-B Modell (auch upper convected Jeffrey's model) beschreibt die zeitliche Entwicklung des Konformationstensors bzw. des Polymerspannungstensors in einem Geschwindigkeitsfeld. Wir gehen von der stochastischen Differentialgleichung

$$dR_{i} = (\partial_{k}u_{i})R_{k}dt - \frac{1}{2\lambda_{H}}R_{i}dt + \sigma dB_{i}(t)$$
(1.76)

aus. Mit der Funktion $C_{ij}(t, \mathbf{R}) = \mathbf{R}_i \mathbf{R}_j$ läßt sich der Konformationstensor schreiben als Erwartungswert

$$\mathbf{c}_{ij} = \langle \mathbf{C}_{ij}(\mathbf{t}, \mathbf{R}) \rangle = \langle \mathbf{C}_{ij} \rangle \,. \tag{1.77}$$

Nach der Ito-Formel gilt für das Differential

$$dC_{ij} = \partial_t C_{ij}(t, \mathbf{R}) dt + \left(\frac{\partial}{\partial R_k} C_{ij}(t, \mathbf{R})\right) dR_k + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial R_k \partial R_l} C_{ij}(t, \mathbf{R})\right) dR_k dR_l.$$
(1.78)

Das Produkt $dR_k dR_l$ wird nach den Regeln $dtdt = dtdB_l(t) = dB_k(t)dt = 0$ und $dB_k(t)dB_l(t) = \delta_{kl}dt$ ausgewertet. So ergibt sich

$$dC_{ij} = R_i dR_j + R_j dR_i + dR_i dR_j$$
(1.79a)

$$= R_i (\partial_k u_j) R_k dt - \frac{R_i}{2\lambda_H} R_j dt + \sigma R_i dB_j$$
(1.79b)

$$+ R_j (\partial_k u_i) R_k dt - \frac{R_j}{2\lambda_H} R_i dt + \sigma R_j dB_i$$
(1.79b)

$$= R_i R_k (\partial_k u_j) dt + (\partial_k u_i) R_k R_j dt - \frac{1}{\lambda_H} R_i R_j dt$$
(1.79c)

Die Erwartungswerte $\langle dB_i\rangle$ verschwinden. Damit erhält man als Bewegungsgleichung für den Konformationstensor

$$\partial_t c_{ij} + (u_k \partial_k) c_{ij} = (\partial_k u_i) c_{kj} + c_{ik} (\partial_k u_j) - \frac{1}{\lambda_H} c_{ij} + \sigma^2 \delta_{ij} .$$
(1.80)

19

Mit $\sigma^2 = 4kT/\zeta$ erhält man das gleiche Ergebnis wie es im folgenden aus einer bei [5] angegebenen Bewegungsgleichung für Funktionen der Polymerlänge hergeleitet wird. Diese Gleichung lautet für eine Funktion B(**R**) (ohne äußere Kräfte, **F** ist die Federkraft)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \langle \mathbf{B} \rangle = (\nabla \mathbf{u}) \cdot \langle \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{B} \rangle + \frac{2\mathbf{k}T}{\zeta} \langle \Delta \mathbf{B} \rangle - \frac{2}{\zeta} \langle \mathbf{F} \cdot \nabla \mathbf{B} \rangle . \qquad (1.81)$$

Für den Konformationstensor $\hat{c} = \langle \mathbf{R} \mathbf{R} \rangle$ ergibt sich damit

$$\underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle - (\nabla \mathbf{u})^{\dagger} \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle - \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle (\nabla \mathbf{u})}_{\langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle_{(1)}} = \frac{4kT}{\zeta} \hat{\delta} - \frac{4}{\zeta} \langle \mathbf{R}\mathbf{F} \rangle . \qquad (1.82)$$

Der Ausdruck auf der linken Seite wird auch als obere konvektive Ableitung bezeichnet. Diese Ableitung wird durch einen eingeklammerten unteren Index gekennzeichnet. Mit hookescher Feder wird daraus

$$\langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle_{(1)} = \frac{4}{\zeta} (kT\hat{\delta} - H \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle)$$
 (1.83)

Als Gleichgewichtskonformation findet man

$$\langle \mathbf{RF} \rangle_{eq} = kT\hat{\delta} \qquad bzw. \qquad \langle \mathbf{RR} \rangle_{eq} = \frac{kT}{H}\hat{\delta}$$
(1.84)

mit der Relaxationszeit

$$\lambda_{\rm H} = \frac{\zeta}{4{\rm H}} \,. \tag{1.85}$$

 ζ ist hierbei der Reibungskoeffizient der Perlen in dem Lösungsmittel. Polymerlängen werden in Einheiten von $\sqrt{kT/H}$ gemessen, Zeiten in Einheiten von l_0/u_0 . Aus der Relaxationszeit wird dann die dimensionslose *Deborahzahl*

$$De = \frac{u_0 \lambda_H}{l_0}.$$
 (1.86)

Die konstitutive Gleichung des Oldroyd-B-Modells ist damit

$$\tau_{ik} = \frac{nkT}{\rho} (c_{ik} - \delta_{ik}) = \frac{s}{DeRe} (c_{ik} - \delta_{ik})$$
(1.87)

mit dem dimensionslosen Konzentrationsparameter

$$s = \frac{nkT\lambda_{\rm H}}{\rho\nu}.$$
 (1.88)

Die Oldroyd-B-Gleichungen für den Konformationstensor und für den Polymerspannungstensor, die in den folgenden Kapiteln verwendet werden, lauten

$$\partial_{\mathbf{t}}\hat{\mathbf{c}} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\hat{\mathbf{c}} = (\nabla\mathbf{u})^{\dagger}\hat{\mathbf{c}} + \hat{\mathbf{c}}(\nabla\mathbf{u}) - \frac{1}{\mathrm{De}}(\hat{\mathbf{c}} - \hat{\delta})$$
(1.89)

$$\partial_{t}\hat{\tau}_{p} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\hat{\tau}_{p} = (\nabla\mathbf{u})^{\dagger}\hat{\tau}_{p} + \hat{\tau}_{p}(\nabla\mathbf{u}) + \frac{s}{\mathrm{De\,Re}}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^{\dagger}) - \frac{1}{\mathrm{De}}\hat{\tau}_{p} \quad (1.90)$$

Deborahzahl und Weissenbergzahl

Die *Deborahzahl* ist das Verhältnis einer charakteristischen Zeit des Polymers zu einer charakteristischen Zeit der Strömung

$$De = \frac{t_{Polymer}}{t_{Strömung}}.$$
 (1.91)

Als t_{Polymer} nimmt man oft die größte auftretende Relaxationszeit der eingebrachten Polymere. Für t_{Strömung} eignet sich oft die Zeiteinheit, die man auch in der Navier-Stokes-Gleichung verwendet: l_0/u_0 . Die ist auch in (1.86) verwendet worden.

Neben der Deborahzahl findet man auch oft die dimensionslose *Weissenbergzahl* We. Man definiert sie als Produkt einer charakteristischen Zeit des Polymer mit einer charakteristischen Verformungsrate der Strömung

$$We = t_{Polymer} \kappa . \tag{1.92}$$

Für κ eignet sich zum Beispiel der größte Lyapunovexponent oder in Scherströmungen die Scherrate $\dot{\gamma}$.

Deborahzahl und Weissenbergzahl werden oft als redundante Definition angesehen, in vielen Fällen gibt es aber nicht nur eine Zeitskala, die man mit der Relaxationszeit der Polymere vergleichen muß. Dann sind unterschiedliche Namen sinnvoll. Wichtig ist in jedem Fall, die genaue Definition der dimensionslosen Größen zu beachten. Definiert man zum Beispiel We = $\lambda\mu$ mit dem größten Lyapunovexponenten μ , so findet man für den coil-stretch-Übergang We_{crit} = 1. Definiert man De wie in (1.86), so ist De_{crit} im allgemeinen nicht 1, sondern $u_0/(\mu l_0)$. Wenn man den Lyapunovexponenten in Abhängigkeit von allen Parametern, die man an der Strömung verändern will, kennt, ist die Verwendung von We = $\lambda\mu$ sicher die sinnvollere Wahl. Bei numerischen Berechnungen, zu denen man den Lyapunovexponenten vorher nicht kennt, wird man auf die bekannten Zeitskalen zurückgreifen.

Die dimensionslose *Deborahzahl* wurde von M. Reiner als das Verhältnis der Relaxationszeit eines Fluids zur Beobachtungszeit eingeführt [58]. Er geht davon aus, daß – wie schon Heraklit zugeschrieben – alles fließt ($\pi \acute{\alpha} v \tau \alpha \ \acute{\rho} \epsilon \tilde{\iota}$). Aber was ist mit den Festkörpern? Nun, es kommt nur auf die Beobachtungszeit an. Seiner Meinung nach sind Festkörper auch flüssig, wenn man nur lange genug beobachtet. Diese Einsicht erkennt er auch bei der Prophetin Deborah, die zusammen mit Barak singt (Buch der Richter):

Vulgata:

5⁴Domine cum exires de Seir et transires per regiones Edom terra mota est caelique ac nubes stillaverunt aquis.

⁵Montes fluxerunt a facie Domini et Sinai a facie Domini Dei Israhel.

King James [79]:

- 5^4 LORD, when thou wentest out of Seir, when thou marchedst out of the field of Edom, the earth trembled, and the heavens dropped, the clouds also dropped water.
- ⁵ The mountains melted from before the LORD, even that Sinai from before the LORD God of Israel.

Reiner moniert, daß es in der "Authorized Version" (King James Version [79]) "melted" und nicht "flowed" heißt. Er nimmt an, daß Deborah zwei Dinge weiß: alles fließt, also auch die Berge, und die Berge fließen vor dem Herrn, nicht vor dem Menschen. t_G , die Zeitskala,in der Gott existiert, ist groß gegenüber der Zeitskala t_B , in der die Berge abgetragen werden. Die Deborahzahl De = t_B/t_G ist also sehr klein, und die Berge zerfließen newtonsch. Auf der Zeitskala des Menschen verhalten sich die Berge wie Festkörper, De ist in diesem Fall sehr groß. "Fluxerunt" im 5. Vers in der Vulgata könnte man tatsächlich auch mit "zerfließen" übersetzen [34].

Bezieht man Vers 4 in die Betrachtung mit ein, so muß man doch an dieser Einsicht der Deborah zweifeln. Anscheinend hat sie hier doch nicht die Erosion über Jahrtausende gemeint, sondern die Erschütterungen durch das Erdbeben, wie auch die Übersetzungen "wankten" der Einheitsübersetzung, "erbebten" der Elberfelder [57] oder "quaked" der NIV [12] nahelegen.

Einheitsübersetzung [39]:

- 5⁴Herr, als du auszogst aus Seïr, / als du vom Grünland Edoms heranschrittest, / da bebte die Erde, die Himmel ergossen sich, / ja, aus den Wolken ergoß sich das Wasser.
- ⁵Die Berge wankten vor dem Blick des Herrn, [das ist der Sinai] / vor dem Blick des Herrn, des Gottes Israels.

New International Version [12]:

- 5^4 O Lord, when you went out from Seir, / when you marched from the land of Edom, / the earth shook, the heavens poured, the clouds poured down water,
- ⁵The mountains quaked before the Lord, the One of Sinai, / before the Lord, the God of Israel (NIV).

Im hebräischen Text steht das Verb "nzl", das mit "rieseln, fließen, überfließen von" übersetzt wird. "Triefen" ist auch eine mögliche Übersetzung von fluxerunt, was nun gar nichts mit der Bewegung zu tun hat, sondern auf den starken Regenfall zurückzuführen ist. Das legt auch eine Parallelstelle in den Psalmen nahe:

- 68⁹ da bebte die Erde, da ergossen sich die Himmel vor Gott, / vor Gott, dem Herrn vom Sinai, vor Israels Gott.
- ¹⁰ Gott, du ließest Regen strömen in Fülle / und erquicktest dein verschmachtendes Erbland.

Die unrevidierte Lutherbibel von 1545 [78] gibt tatsächlich eine entsprechende Übersetzung.

- 4. HErr, da du von Seir auszogest und einhergingest vom Felde Edoms, da erzitterte die Erde, der Himmel troff, und die Wolken troffen mit Wasser.
- 5. Die Berge ergossen sich vor dem HErrn, der Sinai vor dem HErrn, dem GOtt Israels.

Die gängige Interpretation dieser Textstelle ist allerdings die, die auch Reiner annimmt. Dazu gibt es noch eine Stelle in den Psalmen, die das noch deutlicher zum Ausdruck bringt:

97⁵ Berge schmelzen wie Wachs vor dem Herrn, / vor dem Antlitz des Herrschers aller Welt.

Hier ist das verwendete Verb im Hebräischen allerdings "mss": "zerschmelzen, zerfließen", im Lateinischen aber wieder "fluxerunt". Das Wort "fluxerunt" wird also in zwei Bedeutungen verwendet, die im Hebräischen durch zwei Begriffe unterschieden sind. Bei der Übersetzung ins Englische, die Reiner benutzt, ist dieser Bedeutungsunterschied nicht aufgelöst. Das liegt wohl daran, daß die King-James-Version nicht immer konsequent auf den hebräischen Urtext zurückgeht, sondern den Text der bis dahin in den Kirchen gebräuchlichen "Bishops Bible" möglichst wenig verändern sollte, soweit es die Wahrheit des Originals erlaubt [73].

Die Übersetzungen, die "erbeben" verwenden, stützen sich wohl auf die alte griechische Übersetzung, die Septuaginta [77],

- 5⁴ χύριε ἒν τῆ ἐξόδω σοῦ ἒχ Σήιρ ἒν τῶ ἀπαῖρειν σὲ ἒξ ἄγρου Ἐδωμ γῆ ἐσεῖσθη καὶ ὁ ὀυρανὸς ἐξεστάθη καὶ αἱ νεφέλαι ἐστάξαν ὕδωρ
- ⁵ ὄρη ἐσαλεύθησαν ἄπο προσώπου κύριου τοῦτο Σίνα ἄπο προσώπου κύριου θεοῦ Ἰσραήλ.

Hier erscheint das Wort ἐσαλεύθησαν, von σαλεύω (intr.) schwanken.

1.4. Lyapunovexponenten und Verteilungen von Polymerlängen

Der (größte) Lyapunovexponent μ zu einer Trajektorie $\mathbf{x}(t)$ eines dynamischen Systems ist definiert als [61, 1]

$$\mu = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \log \frac{\|\delta \mathbf{x}(T)\|}{\|\delta \mathbf{x}(0)\|}.$$
(1.93)

Bezeichnung	Referenz	L _c	Lp	R _F	τ
λ-DNA	[64]	22 µm			4.1 s
λ-DNA	[64]	22 µm			17.3 s
λ-DNA	[63, 9, 55]	22 µm	53 nm		6.3 – 19 s
PAM	[13]	77 µm		0.5 µm	43 ms

Tabelle 1.2: Daten zu einigen Polymeren. L_c : Konturlänge, L_p : Persistenzlänge, R_F : Flory-Radius, τ : Relaxationszeit.

Referenz	Polymer	De	strain-rate	η	τ
[64]	λ-DNA	$\dot{e}\tau = 2.0$	$d\epsilon/dt = 0.5$	43.3 cP	4.1 s
[64]	λ-DNA	$\dot{e}\tau = 48$	$d\varepsilon/dt = 2.8$	182 cP	17.3 s
[63]	λ-DNA	$\dot{\gamma}\tau=0-76$	$\dot{\gamma} = 0 - 4.0 \mathrm{s}^{-1}$	$\eta = 60; 220 cP$	$\tau = 6.3; 19 s$

Tabelle	1.3:	Daten	zu E	xperim	enten
1400110	· · · ·	Datem		<i>inperim</i>	0110011

Dabei ist $\delta \mathbf{x}(t)$ der Abstandsvektor zu einer Trajektorie in der Nachbarschaft von $\mathbf{x}(t)$. In einer Strömung entwickelt sich der Abstand zwischen zwei Trajektorien mit dem anfänglichen Abstand $s_0 = \|\delta \mathbf{x}(0)\|$ im Mittel wie

$$s(t) = s_0 \exp \mu t$$
, (1.94)

also wie die Lösung eines linearen dynamischen Systems

$$\dot{s} = \mu s \,. \tag{1.95}$$

Hierbei ist allerdings zu beachten, daß der Abstand zwischen den betrachteten Trajektorien immer sehr klein bleibt, das heißt, daß nichtlineare Beiträge vernachlässigbar bleiben. Unter dieser Voraussetzung kann man das Geschwindigkeitsfeld linearisiert betrachten

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\delta\mathbf{x}(t) = (\nabla\mathbf{u}(t))\delta\mathbf{x}(t)$$
(1.96)

und $s_0 = \|\delta \mathbf{x}(0)\| = 1$ wählen. Bei der Berechnung des Lyapunovexponenten wird man die Länge von $\delta \mathbf{x}(t)$ zu geeigneten Zeiten (t_k) wieder auf die Länge s_0 zurücksetzen. Man berechnet also $\delta \tilde{\mathbf{x}}$ mit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\delta\tilde{\mathbf{x}}(t) = (\nabla \mathbf{u}(t))\delta\tilde{\mathbf{x}}(t)$$
(1.97)

und $\delta \tilde{\mathbf{x}}(t_k) = s_0$. Das Produkt der dazu zu verwendenden Normierungsfaktoren

$$n_{k} = \frac{\|\lim_{t \to t_{k}} \delta \tilde{\mathbf{x}}(t)\|}{\|\delta \tilde{\mathbf{x}}(t_{k-1})\|}$$
(1.98)

ergibt dann die Gesamtstreckung

$$\|\delta \mathbf{x}(\mathbf{t}_k)\| = \prod_{i=1}^k n_k.$$
(1.99)

Die Richtung der anfänglichen Störung spielt dabei praktisch (d.h. bei der numerischen Berechnung) keine Rolle. Schon nach wenigen Zeiteinheiten zeigen anfangs unterschiedlich orientierte Störungen in die gleiche Richtung. Das Ergebnis kann aber sehr stark vom Startpunkt der Trajektorie abhängen. Die Phasenräume von dynamischen Systemen sind oft aus regulären und chaotischen Bereichen zusammengesetzt. In den regulären Bereichen, in der Umgebung von stabilen periodischen Bahnen, ist der größte Lyapunovexponent null, während in chaotischen Bereichen der größte Lyapunovexponent positiv ist. In zeitunabhängigen Systemen sind diese unterschiedlichen Bereiche invariante Mengen.

1.4.1. Kurzzeit-Lyapunovexponenten

Beim Kurzzeit-Lyapunovexponenten betrachtet man nicht den Grenzwert $T \rightarrow \infty$ sondern berechnet die mittlere Streckrate entlang eines Trajektorienabschnitts der Dauer T [26, 22]

$$\mu_{\mathsf{T}} = \frac{1}{\mathsf{T}} \log \frac{\|\delta \mathbf{x}(\mathsf{t} + \mathsf{T})\|}{\|\delta \mathbf{x}(\mathsf{t})\|} \,. \tag{1.100}$$

Aus einer Folge von aufeinanderfolgenden Kurzzeit-Lyapunovexponenten $\mu_T(k)$ mit äquidistanten Zeitintervallen T läßt sich der Kurzzeit-Lyapunovexponent zum Intervall nT berechnen

$$\mu_{nT} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mu_{T}(k) = \frac{1}{n} \sum_{k} \frac{1}{T} \log \frac{\|\delta \mathbf{x}(kT)\|}{\|\delta \mathbf{x}((k-1)T)\|}$$
(1.101a)

$$= \frac{1}{nT} \log \prod_{k} \frac{\|\delta \mathbf{x}(kT)\|}{\|\delta \mathbf{x}((k-1)T)\|} = \frac{1}{nT} \log \frac{\|\delta \mathbf{x}(nT)\|}{\|\delta \mathbf{x}(0)\|}.$$
 (1.101b)

Der Mittelwert der Kurzzeit-Lyapunovexponenten führt also auf den Lyapunovexponenten wie bei den Gesetzen der großen Zahlen aus der Wahrscheinlichkeitstheorie. Bei genügend großem T kann man den Kurzzeitlyapunovexponenten als eine Summe von unabhängigen Zufallsvariablen auffassen. Ihre Verteilung nähert sich nach dem zentralen Grenzwertsatz einer Normalverteilung [4]

$$p_{\mu} \approx \sqrt{\frac{T}{2\pi\Delta}} \exp\left[-\frac{T(\mu_{T}-\mu)^{2}}{2\Delta}\right]$$
 (1.102)

mit der Varianz Δ/T . Mit zunehmendem T wird die Verteilung also immer schmaler. Diese Verteilung wird auch oft in der Form

$$p_{\mu} \approx \sqrt{\frac{T}{2\pi\Delta}} \exp\left[-TS(\mu_{T} - \mu)\right]$$
 (1.103)

mit der Entropiedichtefunktion S geschrieben. Von dieser Funktion S wird angenommen, daß sie ein quadratisches Minimum bei 0 hat: $S(x) = x^2/2\Delta$.

Der lokale Lyapunovexponent [20] ist der Grenzwert des Kurzzeit-Lyapunovexponenten für $T \to 0$

$$\mu_{\text{loc}}(\mathbf{x}(t)) = \lim_{T \to 0} \frac{1}{T} \log \frac{\|\delta \mathbf{x}(t+T)\|}{\|\delta \mathbf{x}(t)\|} \,. \tag{1.104}$$

Dieser gibt die lokale Streckrate am Ort $\mathbf{x}(t)$ in der Richtung von $\delta \mathbf{x}(t)$ an. t soll dabei so groß sein, daß die Orientierung von $\delta \mathbf{x}(0)$ keine Rolle mehr spielt. Der lokale Lyapunovexponent läßt sich auch schreiben als

$$\mu_{\text{loc}}(\mathbf{x}(t)) = \mathbf{e}_{1}^{\mathsf{T}}(\mathbf{x}(t))(\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}(t)))\mathbf{e}_{1}(\mathbf{x}(t)). \qquad (1.105)$$

Dieser entspricht dem $\kappa(t)$ in (1.71). Die e_1 sind dabei die Einheitsvektoren in Richtung von δx . Die Kurzzeit-Lyapunovexponenten können dann durch Integration über μ_{loc} berechnet werden

$$\mu_{T}(\mathbf{x}(t)) = \frac{1}{T} \int_{t}^{t+T} \mu_{loc}(\mathbf{x}(t')) dt'.$$
(1.106)

1.4.2. Streckung von Polymeren

Aus der Form der Verteilung der Lyapunovexponenten (1.103) mit quadratischem Minimum von S leitet Balkovsky ein asymptotisches Potenzgesetz P(R) $\propto R^{-\alpha-1}$ für die Polymerlänge R ab [2, 3]. Für den Exponenten gilt

$$\alpha = S' \left(\beta - \left(\mu - \frac{1}{2\lambda} \right) \right) \tag{1.107}$$

mit dem Sattelpunktwert β und der Relaxationszeit der Polymere 2 λ . Dabei setzt er voraus, daß die Rückstellkraft proportional zur Auslenkung aus der Gleichgewichtslage ist. Das ist dann der Fall, wenn die Polymere in der Kräuelstruktur vorliegen, bzw. nur wenig gestreckt sind. Wenn die Relaxationsrate kleiner als der Lyapunovexponent ist, ist das im allgemeinen nicht mehr der Fall. Die meisten Polymermoleküle gehen dann in den gestreckten Zustand über, und die obige Gleichung führt auf eine Verteilung mit einem Exponenten größer als -1, die dann aber nicht mehr normierbar ist. Dieser Übergang vom Knäuelzustand zum gestreckten Zustand wird als *coilstretch-Übergang* bezeichnet [14]. Er wird als sehr wichtig im Zusammenhang mit der turbulenten Widerstandsreduktion angesehen.

Wird die Polymerlänge nach oben beschränkt, ist die Normierbarkeit der Verteilung kein Problem mehr. Das obige Potenzgesetz gilt dann weiterhin und es sind auch Exponenten größer als -1 möglich. Für $|\mu - 1/(2\lambda)| \ll 1$ findet man $\alpha'(1/(2\lambda)) = -2/\Delta$. Der Parameter Δ bestimmt also sowohl die Verteilungen der Kurzzeitlyapunovexponenten als auch die Exponenten der Polymerlängenverteilungen.

Verteilungen, die einem Potenzgesetz folgen, sind schon seit langer Zeit aus den verschiedensten Bereichen von Biologie, Linguistik und Ökonomie bekannt. Sornette
[66] und Takayasu [70] zeigen, daß die Verteilungen in Form eines Potenzgesetzes allgemein bei multiplikativen Prozessen auftreten, die bei negativer Drift nach unten beschränkt sind. Dasselbe gilt natürlich auch für Prozesse mit positiver Drift und oberer Schranke.

Ein multiplikativer Prozeß sei gegeben durch

$$W_{\rm t} = w_1 w_2 \cdots w_{\rm t} \,. \tag{1.108}$$

Sornette und Cont geben zwei notwendige und hinreichende Bedingungen für ein Potenzgesetz $P(W_t) \sim W_t^{-(1+\alpha)}$ in der Verteilung W_t [66].

- $\langle \log w_j \rangle < 0$
- W_t darf nicht zu klein werden

Der Exponent läßt sich dann als Lösung von $\langle w_i^{\alpha} \rangle = 1$ bestimmen.

Die Streckung und Relaxation der Polymere kann als ein derartiger Prozeß angesehen werden. Die Entwicklung der Länge

$$R(t) = \exp\left(\int_{t_0}^t \mu_{\text{loc},\lambda}(t')dt'\right), \qquad \mu_{\text{loc},\lambda}(t) = \mathbf{R}(\nabla \mathbf{u})^{\dagger}\mathbf{R}/R^2 - \frac{1}{2\lambda} \qquad (1.109)$$

kann als Grenzwert einer Folge

$$R(t) = \exp\left(\sum_{i} \int_{iT}^{(i+1)T} \mu_{loc,\lambda}(t') dt'\right) = \exp\left(\sum_{i} m_{\lambda,i}\right) = \prod_{i} \exp(m_{\lambda,i}),$$
(1.110)

$$\mathfrak{m}_{\lambda,i} = \int_{iT}^{(i+1)T} \mu_{\mathrm{loc},\lambda}(t') dt' \qquad (1.111)$$

dargestellt werden. Die Faktoren $\exp(m_{\lambda,i})$ entsprechen dann den Faktoren w_i in (1.108). Die erste der obigen Bedingungen heißt dann

$$\langle \mathfrak{m}_{\lambda,i} \rangle < \mathfrak{0} \,, \tag{1.112}$$

die zweite kann durch Addition einer positiven Zufallsvariablen oder durch geeignetes Zurücksetzen der Länge bei zu klein werdenden Werten gewährleistet werden. Der Exponent läßt sich dann als Lösung der Gleichung

$$\langle \exp(\mathfrak{m}_{\lambda,i})^{\alpha} \rangle = \langle \exp(\alpha \mathfrak{m}_{\lambda,i}) \rangle = 1$$
 (1.113)

bestimmen.

1. Grundlagen

1.4.3. Exponentielles Wachstum

Eine Größe R, die der Differentialgleichung $\dot{R} = \mu(t)R$ genügt, hat den zeitlichen Verlauf $R(t) = R_0 \exp \int_0^t \mu(t') dt'$. Für konstantes $\mu(t) = \mu$ zeigt die Trajektorie im betrachteten Zeitfenster eine Verteilungsdichte $P(R) \propto 1/R$.

$$P(R) \propto \int \delta(R - R_0 e^{\mu t}) dt = \sum_{\mu t = \log R/R_0} \left| \mu R_0 e^{\mu t} \right|^{-1} = \frac{1}{\mu R}$$
(1.114)

Dies kann für nicht konstante $\mu(t)$ verallgemeinert werden:

$$\begin{split} P(R) &\propto \int \delta \left(R - R_0 \exp \int_{t_0}^t \mu(t') dt' \right) dt & (1.115a) \\ &= \int_{\{t_i \mid \int_{t_0}^{t_i} \mu(t') dt' = \log R/R_0\}} \sum_{|\mu(t_i) R_0 \exp \int_{t_0}^{t_i} \mu(t') dt'|} dt \\ &= \int_{\{t_i \mid \int_{t_0}^{t_i} \mu(t') dt' = \log R/R_0\}} \frac{\delta(t - t_i)}{|\mu(t_i) R|} dt \\ &= \frac{1}{|R|} \sum_{\{t_i \mid \int_{t_0}^{t_i} \mu(t') dt' = \log R/R_0\}} \frac{1}{|\mu(t_i)|} & (1.115b) \end{split}$$

Gleichung (1.115b) für linear wachsendes $\mu(t) = \mu_0 t$ ausgewertet ergibt eine Verteilung $P_{lin}(R) \propto 1/(R\sqrt{2\mu_0\log R})$ (s. Abb. 1.4). Für exponentiell fallendes $\mu(t) = \mu_0 e^{-\lambda t}$ erhält man eine Verteilung $P_{exp} \propto 1/(R|\lambda \log(R/R_0) - \mu(t_0)|).$

Im Fall der ABC-Stömung, die wir in Kapitel 2 diskutieren werden, ergeben sich in Histogrammen der momentanen Polymerlängen entlang von Trajektorien unter bestimmten Umständen ebenfalls Verteilungen proportional zu 1/R wie in (1.114). Diese treten auf, wenn die Streckung durch die Strömung die Relaxation überwiegt, $\mu(t) - 1/(2\lambda)$ im Mittel also positiv ist. Die Histogramme werden dazu aus den momentanen Polymerlängen entlang einer Trajektorie zu äquidstanten Zeitpunkten erstellt.

1.5. Geometrische Eigenschaften der Trajektorien

In einem dynamischen System ist die Geschwindigkeit als Funktion von Ort und Zeit gegeben als

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \tag{1.116}$$

Daraus lassen sich die Beschleunigung und die zweite Ableitung der Geschwindigkeit berechnen

$$\dot{\mathbf{u}} = \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \tag{1.117a}$$

$$\ddot{\mathbf{u}} = \partial_{t}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{u} \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}}$$
(1.117b)

$$= \partial_{t}^{2} \mathbf{u} + (\partial_{t} \mathbf{u}) \cdot \nabla \mathbf{u} + 2\mathbf{u} \cdot \partial_{t} \nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \qquad (1.117c)$$



Abbildung 1.4: Zeitliche Entwicklung der Polymerlänge (unten links) bei linear ansteigendem μ (oben links) und Histogramm (rechts) des Zeitverlaufs nach (1.115b).

In jedem Punkt kann man nun das sogenannte begleitende Dreibein aus Tangentialvektor, Hauptnormalenvektor und Binormalenvektor berechnen [28]. Der Tangentialvektor ist definiert als

$$\mathbf{t} = \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}s} = \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|} \,. \tag{1.118}$$

Der Hauptnormalenvektor steht senkrecht auf dem Tangentialvektor und zeigt in Richtung der Normalbeschleunigung. Er ergibt sich aus der Beschleunigung

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\kappa} \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}}{\mathrm{d}s^2} = \frac{1}{\kappa} \frac{\mathrm{d}\mathbf{t}}{\mathrm{d}s} \tag{1.119}$$

mit der Krümmung

$$\kappa = \frac{\sqrt{\dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} - (\mathbf{t} \cdot \dot{\mathbf{u}})^2}}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}.$$
 (1.120)

Der Binormalenvektor steht senkrecht auf Tangential- und Hauptnormalenvektor:

$$\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n} \,. \tag{1.121}$$

1. Grundlagen

Die zeitliche Entwicklung dieser drei Basisvektoren wird durch die Frénetschen Formeln

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{t}}{\mathrm{d}s} = \kappa \mathbf{n}, \qquad (1.122a)$$

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{n}}{\mathrm{d}s} = \tau \mathbf{b} - \kappa \mathbf{t}, \qquad (1.122\mathrm{b})$$

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{b}}{\mathrm{d}s} = -\tau \mathbf{n} \tag{1.122c}$$

beschrieben. Dabei ist τ die Torsion

$$\tau = \frac{\mathbf{u} \cdot (\dot{\mathbf{u}} \times \ddot{\mathbf{u}})}{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^3 \kappa^2}.$$
 (1.123)

Aus der Krümmung und der Torsion lassen sich jeweils der Krümmungs- und der Torsionsradius bestimmen:

$$\rho = 1/\kappa \qquad \sigma = 1/\tau \,. \tag{1.124}$$

Die Spirale

$$\mathbf{r}(t) = \begin{pmatrix} R\cos\omega t\\ R\sin\omega t\\ \beta\omega t \end{pmatrix} \qquad \mathbf{u}(x,y) = \omega \begin{pmatrix} -y\\ x\\ \beta \end{pmatrix} \qquad (1.125)$$

kann als Normalform einer Kurve mit konstanter Krümmung und Torsion angesehen werden. Für Krümmung, Torsion und Bahngeschwindigkeit findet man

$$\kappa = \frac{R}{R^2 + \beta^2} \qquad \tau = \frac{\beta}{R^2 + \beta^2} \qquad u = \omega \sqrt{R^2 + \beta^2}.$$
(1.126)

Zu beliebigen Trajektoriensegmenten wird in einem Punkt \mathbf{x}_0 das begleitende Dreibein sowie Krümmung und Torsion bestimmt. Der Radius, Axial- und Winkelgeschwindigkeit sind dann

$$R = \frac{\kappa}{\kappa^2 + \tau^2} \qquad \beta = \frac{\tau}{\kappa^2 + \tau^2} \qquad \omega = \sqrt{u^2(\kappa^2 + \tau^2)} \qquad (1.127)$$

Der Krümmungsmittelpunkt ist

$$\mathbf{m} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{R}\mathbf{n} \,. \tag{1.128}$$

Der Normalenvektor bewegt sich in die Richtung

$$\dot{\mathbf{n}} = \tau \mathbf{b} - \kappa \mathbf{t} \tag{1.129}$$

Die Achse der Spirale steht senkrecht auf n und n

$$\mathbf{s} = \frac{1}{N_s} \mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}} \tag{1.130}$$

mit geeignetem Normierungsfaktor Ns. Die Spirale ist dann

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{m} + \mathbf{R}(\mathbf{n} \times \mathbf{s}\sin(t) - \mathbf{n}\cos(t)) + \beta \omega t \mathbf{s}. \qquad (1.131)$$

Beliebige Trajektorien kann man nun mit den so erhaltenen Spiralen vergleichen.

Wir betrachten die linearisierte Geschwindigkeit **u** im Punkt $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$. Die setzt sich aus einer Translation $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})$ und einem Vektor $L \cdot d\mathbf{x}$ mit der Jacobimatrix $L = \partial_i \mathbf{u}_j$ zusammen. Die Jacobimatrix ist zerlegt in den symmetrischen Anteil $S = \frac{1}{2}(L + L^T)$ und den antisymmetrischen Anteil $A = \frac{1}{2}(L - L^T)$

$$S = \begin{pmatrix} S_1 & S_2 & S_3 \\ S_2 & S_4 & S_5 \\ S_3 & S_5 & S_6 \end{pmatrix} \qquad A = \begin{pmatrix} 0 & A_1 & A_2 \\ -A_1 & 0 & A_3 \\ -A_2 & -A_3 & 0 \end{pmatrix}$$
(1.132)

$$\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{d}\mathbf{x}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) + (\mathbf{S} + \mathbf{A})\mathbf{d}\mathbf{x}$$
(1.133)

Das Koordinatensystem sei so gewählt, daß $\mathbf{u}_0(\mathbf{x}) = |\mathbf{u}_0(\mathbf{x})|\mathbf{e}_1$. Dann gilt für Krümmung und Torsion der Trajektorie, die durch \mathbf{x} läuft

$$\kappa = \sqrt{\frac{(S_2 - A_1)^2 + (S_3 - A_2)^2}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}}$$
(1.134)

$$\tau = \frac{-A_3}{|\mathbf{u}|} + S_5 \left(2\frac{(S_2 - A_1)^2}{\kappa^2} - 1 \right) + \frac{S_2 - A_1}{\kappa} \sqrt{1 - \frac{(S_2 - A_1)^2}{\kappa^2}} (S_6 - S_4) \quad (1.135)$$

1. Grundlagen

2.1. Grundlagen

Die klassische ABC-Strömung [17] wurde von Arnold als stationäre Lösung der Eulergleichung eingeführt. Childress verwendete den Spezialfall A = B = C = 1 als Modell für den kinematischen Dynamoeffekt. Wir verwenden eine modifizierte Version dieser Strömung

$$\mathbf{u} = -\frac{A}{\pi} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{z} (\sin \pi x \cos \pi y) + \frac{B}{\pi} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{y} (\sin \pi x \cos \pi z) + \frac{C}{\pi} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{x} (\cos \pi y + \sin \pi z)$$
(2.1a)

$$= \begin{pmatrix} (A \sin \pi y + B \sin \pi z) \sin \pi x \\ A \cos \pi y \cos \pi x + C \cos \pi z \\ B \cos \pi z \cos \pi x + C \sin \pi y \end{pmatrix}$$
(2.1b)

mit konstanten Amplituden A, B und C. Als reines Wirbelfeld ist die Strömung divergenzfrei.

2.1.1. Symmetrien

Die Gleichungen sind periodisch in x, y und z mit Periodenlänge 2. Die x-Komponente der Geschwindigkeit verschwindet bei ganzzahligen x, ebenso die x-Ableitung der anderen Geschwindigkeitskomponenten

$$u_{x}\big|_{x\in\mathbb{Z}} = \partial_{x}u_{y}\big|_{x\in\mathbb{Z}} = \partial_{x}u_{z}\big|_{x\in\mathbb{Z}} = 0.$$
(2.2)

Diese Ebenen sind also invariante Mengen, die Trajektorien können diese Ebenen nicht durchdringen. Die Gleichungen sind invariant unter den Transformationen

$$S_1^0: \quad x' = x \quad y' = 1 + y \quad z' = 1 + z \quad t' = -t$$

$$S_2^0: \quad x' = 1 + x \quad y' = y \quad z' = 1 - z \quad t' = -t$$

$$S_3^0: \quad x' = -x \quad y' = 1 + y \quad z' = 1 + z \quad t' = -t .$$
(2.3)



Abbildung 2.1: Trajektorien in der ABC-Strömung. In der Farbe ist die Krümmung der Trajektorien, κ , codiert. Die Länge der Trajektorienstücke beträgt t = 0.8. A = B = 1, C = 0.8.

Die Quadrate dieser Transformationen sind jeweils die Identität. Sie erzeugen eine Symmetriegruppe mit den Elementen

I: Identität (2.4)

$$S_2^0S_1^0: x' = 1 + x \quad y' = 1 + y \quad z' = -z \quad t' = t$$

 $S_3^0S_1^0: x' = -x \quad y' = y \quad z' = z \quad t' = t$
 $S_3^0S_2^0: x' = 1 - x \quad y' = 1 + y \quad z' = -z \quad t' = t$
 $S_3^0S_2^0S_1^0: x' = 1 - x \quad y' = y \quad z' = 1 - z \quad t' = -t$.

Die Transformationen

$$P_{1}: A' = -A \quad y' = -y \quad z' = 1 - z$$

$$P_{2}: B' = -B \quad y' = 1 - y \quad z' = 1 + z$$

$$P_{3}: C' = -C \quad y' = y \quad z' = 1 - z.$$

$$(2.5)$$

ändern jeweils das Vorzeichen genau eines Parameters. So kann man sich auf positive Parameterwerte und den Bereich $(x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 2] \times [0, 2]$ beschränken.

2.1.2. Ein integrabler Fall

Für C = 0 ist das System separabel. Wenn A und B beide nicht verschwinden, ist

$$\alpha = \frac{\tan\left(\frac{\pi y}{2} + \frac{\pi}{4}\right)}{\tan^{\frac{A}{B}}\left(\frac{\pi z}{2} + \frac{\pi}{4}\right)}$$
(2.6)

2.1. Grundlagen

eine Konstante der Bewegung, und man kann y als Funktion von z ausdrücken

$$y(z) = \frac{2}{\pi} \arctan\left(\alpha \tan^{\frac{A}{B}} \frac{\pi z}{2} + \frac{\pi}{4}\right) - \frac{1}{2}.$$
 (2.7)

Für das Differential von x ergibt sich schließlich

$$\cot \pi x dx = \frac{A \sin \pi y(z) + B \sin \pi z}{B \cos \pi z} dz.$$
 (2.8)

2.1.3. Fixpunkte

Falls für die (positiven) Parameter die Ungleichung

$$C \le B\sqrt{\frac{\alpha^2}{2} + \alpha\sqrt{\frac{5}{4}\alpha^2 - 1}}$$
 mit $\alpha = \frac{A}{B} > \sqrt{\frac{4}{5}}$ (2.9)

gilt, hat das System mindestens einen Fixpunkt im Inneren der Periodizitätsbox. Bei

$$C \le B\sqrt{\frac{\alpha^2}{2} - \alpha\sqrt{\frac{5}{4}\alpha^2 - 1}}$$
(2.10)

sind es sogar zwei. Sei $\gamma = C/A$. Die Fixpunkte liegen bei

$$y_{\pm} = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left(\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{5}{4} \alpha^2 - 1} \right),$$
 (2.11a)

$$z_{\pm} = \frac{1}{\pi} \sin^{-1}(-\alpha \sin \pi y_{\pm}),$$
 (2.11b)

$$x_{\pm} = \frac{1}{\pi} \cos^{-1}(\gamma \tan \pi z_{\pm})$$
 (2.11c)

$$= \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(-\gamma \frac{\alpha \sin \pi y_{\pm}}{\sqrt{1 - \alpha^2 \sin^2 \pi y_{\pm}}} \right)$$

Zu diesen Fixpunkten kommen bei C \neq 0 und $\alpha \leq 1/(1 - (B/C)^2)$ noch Fixpunkte in den invarianten Ebenen mit ganzzahligen x. Diese liegen bei

$$y = \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \frac{BA}{C^2}$$
 (2.12a)

$$z = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \mp \frac{A}{C} \frac{1}{\sqrt{1 + (\frac{BA}{C^2})^2}}.$$
 (2.12b)

Das negative Vorzeichen gilt bei geraden x, das positive bei ungeraden.



Abbildung 2.2: Lage der Fixpunkte und heteroklinen Orbits der ABC-Strömung mit C = 0 und A = B. Die Fixpunkte sind rot eingezeichnet, die heteroklinen Orbits blau. Die Pfeile zeigen die stabilen und instabilen Richtungen an.

Da die Divergenz der Strömung verschwindet, verschwindet auch die Summe der Eigenwerte der Linearisierung um die Fixpunkte. Die Fixpunkte sind also alle Sattelpunkte. Die Eigenwerte der Fixpunkte in den invarianten Ebenen sind

$$\lambda_1 = \pm \pi (A \sin \pi y + B \sin \pi z)$$
 (2.13a)

$$\lambda_{2,3} = -\frac{\lambda_1}{2} \pm \sqrt{\frac{\lambda_1^2}{4} - (AB\pi^2 \sin \pi y + C^2 \pi^2 \cos \pi y) \sin \pi z}.$$
 (2.13b)

Das positive Vorzeichen bei λ_1 gilt in den Ebenen mit geradem x, das negative bei ungeradem x. Der Eigenvektor zu λ_1 steht senkrecht auf der Ebene.

Für $C \rightarrow 0$ wandern die Fixpunkte nach

$$\left\{ (\mathbf{x},\mathbf{y},z) \middle| \mathbf{x} \in \mathbb{Z}; \mathbf{y}, z \in \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\} \right\}.$$
 (2.14)

Für A = B sind die Fixpunkte mit y = z Fußpunkte von heteroklinen Orbits, die entlang der Geraden

$$\left\{ (x, y, z) \middle| y = \frac{1}{2}, \ z = \frac{1}{2} \right\}$$
(2.15a)

$$\left\{ (x, y, z) \middle| y = \frac{3}{2}, \ z = \frac{3}{2} \right\}$$
(2.15b)

jeweils benachbarte Ebenen verbinden. Ebenfalls für A = B sind alle Punkte auf den Geraden

$$\left\{ (x, y, z) \middle| y = \frac{1}{2}, z = \frac{3}{2} \right\}$$
(2.16a)

$$\left\{ (x, y, z) \middle| y = \frac{3}{2}, z = \frac{1}{2} \right\}$$
(2.16b)

Fixpunkte. Der Eigenwert mit dem Eigenvektor in x-Richtung verschwindet, die anderen Eigenwerte dieser Fixpunkte sind

$$\lambda = \pm A\pi \cos \pi x \,. \tag{2.17}$$

Die Eigenvektoren hierzu zeigen in y- bzw. z-Richtung. Abb. 2.2 zeigt die Lage dieser Objekte im Strömungsgebiet.

Die hier verwendete Strömung ist der Spezialfall mit n = 0 einer größeren Klasse von Strömungen, die in Anhang A.5 angegeben ist. Im folgenden wird noch der Fall mit n = 2 betrachtet, der die gleichen Symmetrieeigenschaften hat. Auch in dieser Strömung existieren bei A = B und C = 0 die heteroklinen Orbits und die aus Fixpunkten bestehenden Geraden. Dabei verschwindet allerdings u in den Ebenen $\{x \in \mathbb{Z}\}$ wegen eines zusätzlichen Faktors $\sin^2 \pi x$ in allen Geschwindigkeitskomponenten.

2.2. Verteilung von Lyapunovexponenten und Polymerlängen

Für Ensembles von Trajektorien wurden die Kurzzeitlyapunovexponenten μ_T für verschiedene Mittelungsintervalle T berechnet. Die in Abb. 2.3 dargestellten empirischen Verteilungsfunktionen zeigen die Mittelung sowohl über das Ensemble als auch über die Zeit, also über mehrere aufeinanderfolgende Intervalle der Dauer T. Die Verteilungen zeigen jeweils ein Maximum in der Nähe des größten Lyapunovexponenten. Die Breite dieses Maximums nimmt mit der Länge des Mittelungsintervalls T ab. Bei einigen Parameterwerten tritt neben diesem Hauptmaximum noch ein weiteres Maximum bei 0 auf. Das ist auf die Bewegung der Trajektorien in und in der Nähe der Inseln mit stabilen periodischen Bahnen zurückzuführen.

Die Breite des Hauptmaximums wurde als Varianz σ^2 einer Normalverteilung bestimmt. Abhängig vom Mittelungsintervall T verhält sie sich wie $\sigma^2(T) = \Delta/T$ (vgl. 1.4.1). Der Parameter Δ wurde so für verschiedene Parameterwerte der Strömung bestimmt.

In dieser Strömung wurde auch das Verhalten von Polymeren untersucht. Die Relaxationszeit der Polymerlänge sei $2\lambda_H$, die Deborahzahl habe den gleichen Zahlenwert



Abbildung 2.3: Verteilung der Kurzzeitlyapunovexponenten für unterschiedliche Mittelungsintervalle T. Je länger das Intervall, desto schmaler wird die Verteilung. Die Verteilung konzentriert sich um den größten Lyapunovexponenten, allerdings bleibt bei einigen Parameterwerten und endlichen Zeitintervallen ein Nebenmaximum bei 0 bestehen. Dieses rührt von Trajektorien her, die sich lange Zeit im Bereich der Inseln mit regulärer Bewegung aufhalten. A = B = 1, C = 0.3 bei den oberen vier Teilbildern, C = 0.6 bei den unteren.



Abbildung 2.4: Vergleich der aus (2.19) bestimmten Verteilungsexponenten (\Box) mit den in den Verteilungen beobachteten Exponenten (\blacklozenge). Die strichpunktierte Linie zeigt eine nach (2.21) angepaßte Gerade (der Sichtbarkeit wegen um 0.5 nach unten versetzt). A = B = 1.0, C = 0.3, $5 \le T \le 20$.

wie die halbe Relaxationszeit der Polymerlänge¹,

$$De = \lambda_H. \tag{2.18}$$

In den gleichen Einheiten werden auch die Lyapunovexponenten gemessen.

Bei nach oben und unten beschränkter Polymerlänge ergibt sich aus dem Zusammenwirken von Streckung und Relaxation eine Längenverteilung, die in einem gewissen Bereich einem Potenzgesetz genügt. Der Exponent dieser Verteilung, geschrieben als $-(1 + \alpha)$, läßt sich aus den Momenten der Verteilung der Lyapunovexponenten bestimmen,

$$\langle \exp\left(\alpha\left(m_{\mathrm{De}}\right)\right) \rangle = 1.$$
 (2.19)

Die m_{De} sind dabei wie in (1.111) als Streckfaktor eines Polymers entlang eines Trajektorienstücks der Dauer T definiert,

$$\mathbf{m}_{\mathrm{De}} = \int_{\mathrm{t}}^{\mathrm{t+T}} \left(\mathbf{R} (\nabla \mathbf{u})^{\dagger} \mathbf{R} / \mathbf{R}^2 - \frac{1}{2\mathrm{De}} \right) \mathrm{dt'} \,. \tag{2.20}$$

Die so bestimmten Exponenten sind in Abb. 2.4 zusammen mit den direkt aus den Verteilungen bestimmten Exponenten dargestellt.

¹Zum Faktor 2 vgl. Fußnote 3 auf Seite 17

Der Parameter Δ aus den Verteilungen der Lyapunovexponenten taucht auch im Exponenten der Verteilung der Polymerlängen P(R) $\propto R^{-1-\alpha}$ auf. Hier besteht ein linearer Zusammenhang zwischen α im Exponenten der Verteilung und der Differenz von Relaxationsrate und Lyapunovexponent, wenn die Differenz klein ist,

$$\alpha = \frac{2}{\Delta} \left(\mu - \frac{1}{2\text{De}} \right) \,. \tag{2.21}$$

Der Exponent der Verteilung erreicht den kritischen Wert -1, wenn die Relaxationszeit gleich dem inversen Lyapunovexponenten ist. Das kann man in Abb. 2.7 für die in der Länge sowohl nach oben als auch nach unten beschränkten Polymere gut erkennen. Die kritische Deborahzahl zum coil-stretch-Übergang fällt hier wie erwartet mit dem Lyapunovexponenten zusammen. In Abb. 2.5 ist die Länge nach oben nicht beschränkt, sie wird aber bei Erreichen des Wertes 100 wieder auf den Wert 1 zurückgesetzt, so daß eine Verteilung im Fließgleichgewicht entsteht. In diesem Fall erreicht der Exponent der Verteilung nicht den Wert -1, sondern bleibt auch für große Relaxationszeiten deutlich unterhalb dieses Wertes (Abb. 2.5). Bei einer deutlich höheren oberen Grenze nähert sich der Exponent für $\mu \ll 1/(2De)$ allerdings dem Wert -1 an. Hier wächst die Polymerlänge im Mittel exponentiell an und erzeugt eine Verteilung, die für große R proportional zu 1/R ist (vgl. Abschnitt 1.4.3).

Aus der Steigung der Kurven in Abb. 2.7 unten kann der Parameter Δ bestimmt werden. In Abb. 2.8 sind die für verschiedene Werte des Parameters C auf diesen beiden Wegen bestimmten Werte für Δ dargestellt. Die Werte aus den Polymerlängenverteilungen liegen meist etwa 10 – 20% unter den Werten aus den Verteilungen der Lyapunovexponenten.

2.3. Kritische Deborahzahl

Die oben beschriebenen Untersuchungen zeigen gute Übereinstimmung mit den Vorhersagen von Balkovsky, die kritische Deborahzahl zum coil-stretch-Übergang ist der Kehrwert des Lyapunovexponenten. Die Berechnungen hierzu wurden im Lagrangebild durchgeführt, also entlang Trajektorien in der Strömung. Berechnungen mit einem Pseudospektralcode [42] an festen Gitterpunkten im Eulerbild zeigen aber in bestimmten Bereichen ein deutlich anderes Verhalten. Oberhalb einer gewissen Deborahzahl, die deutlich unterhalb des inversen Lyapunovexponenten liegt, wächst die Polymerlänge in bestimmten Bereichen der Strömung sehr stark an.

Die ABC-Strömung hat bei geeigneten Werten für A, B und C Fixpunkte in den invarianten Ebenen mit ganzzahliger Koordinate x (vgl. 2.1.3). Die Fixpunkte sind Sattelpunkte mit positiven und negativen Eigenwerten der Linearisierung. Die Eigenwerte abhängig von B und C bei konstantem A = 1 sind in Abb. 2.9 dargestellt. Berechnungen im Eulerbild zeigen kritische Deborahzahlen, die dem größten Eigenwert dieser Fixpunkte entsprechen. Tatsächlich treten auch die größten Polymerlängen lokalisiert



Abbildung 2.5: Oben: Verteilung der Polymerlänge bei unterschiedlichen Relaxationszeiten. Die Polymerlänge ist nicht nach oben beschränkt, doch Polymere, deren Länge den Wert 100 überschreiten, werden auf Länge 1 zurückgesetzt. So ergibt sich eine Verteilung im Fließgleichgewicht. Die Verteilungen folgen in weiten Bereichen einem Potenzgesetz. Das gestrichelte Trapez markiert den Bereich, über den die Exponenten bestimmt wurden. Der obere Schenkel fällt mit dem Exponenten -1 ab. Unten: Exponenten der Längenverteilungen. Die Exponenten bleiben immer unterhalb von -1. Die vertikalen Linien zeigen jeweils den größten Lyapunovexponenten der Strömung bei diesen Parameterwerten. A = B = 1.



Abbildung 2.6: Wie Abb. 2.5, die Länge wird aber erst bei Erreichen des Wertes 10^6 auf 1 zurückgesetzt. Bei $\mu \ll 1/(2De)$ wächst die Länge im Mittel exponentiell an und es bildet sich für große R eine Verteilung proportional zu 1/R heraus (s. 1.4.3). Die vertikalen Linien zeigen jeweils den größten Lyapunovexponenten der Strömung bei diesen Parameterwerten.



Abbildung 2.7: Oben: Verteilungen der Längen eines Ensembles von 1000 Polymeren in der ABC-Strömung mit A = B = 1 und C = 0.8 bei einer Relaxationszeit De = 8. Dargestellt sind die Verteilungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die Polymerlänge ist nach oben durch eine feste Grenze bei R = 100 beschränkt, unterhalb dieser Grenze können die Polymere frei gestreckt werden. Die Verteilungen folgen in weiten Bereichen einem Potenzgesetz. Der Exponent der Verteilung wurde durch Anpassung in dem markierten Bereich unter Einbeziehung der Verteilungen zu allen dargestellten Zeiten bestimmt.

Unten: Exponenten der Längenverteilungen bei unterschiedlichen Parametern C und Relaxationszeiten. Die vertikalen Linien zeigen jeweils den größten Lyapunovexponenten der Strömung bei diesen Parameterwerten. Bei diesen Werten erreichen die Exponenten jeweils den kritischen Wert -1.



Abbildung 2.8: Vergleich der Verteilungsparameter ∆ zum einen erhalten aus den Verteilungen der Kurzzeitlyapunovexponenten (♦), zum anderen aus den Verteilungen der Polymerlängen (□).



Abbildung 2.9: Eigenwerte der Fixpunkte der ABC-Strömung in den Flächen mit ganzzahligem x. Der Parameter A hat den Wert 1.



Abbildung 2.10: trĉ in der Umgebung eines Fixpunktes in der invarianten Ebene {x = 0}. A = B = 1, C = 0.8, De = 0.22, t = 10.

in der Nähe dieser Fixpunkte auf. Je näher die Teilchen dem Fixpunkt kommen, desto länger sind sie den Strömungs- und Streckungsverhältnissen der Umgebung dieses Fixpunktes ausgesetzt und desto weniger spielt die Vergangenheit der Teilchen eine Rolle. Die Stabilitätseigenschaften der Fixpunkte kontrollieren hier also lokal die Streckung der Polymere. Grundsätzlich könnte nun jede invariante Menge, neben Fixpunkten also auch periodische Bahnen, bei geeignet großem Eigenwert der Linearisierung das Stabilitätsverhalten der Strömung bestimmen, da auch hier Trajektorien beliebig lange in der unmittelbaren Umgebung dieser Gebilde bleiben können. Die kritische Deborahzahl aus dem Lyapunovexponenten muß für jede invariante Menge einzeln berechnet werden, und die kleinste dabei auftretende kritische Deborahzahl bestimmt dann die kritische Deborahzahl des gesamten Systems.

Bei den Parameterwerten A = 1, B = 0.4, C = 0.6 existiert kein Fixpunkt in den Oberflächen (s. Abb. 2.9). Die Berechnungen mit dem Spektralcode zeigen eine kritische Deborahzahl von etwa 0.32 (Abb. 2.11). Hier treten die größten Polymerlängen ebenfalls bei den Flächen mit ganzzahligen x auf. In diesem Fall gibt es einen periodischen Orbit (die Enden des Periodizitätsbereichs werden identifiziert), der innerhalb der Ebene stabil ist, der aber eine instabile Richtung hat, die aus der Ebene hinauszeigt (Abb. 2.12). Der Lyapunovexponent auf diesem Orbit beträgt ca. 2.74, was einer kritischen Deborahzahl von 0.182 (bzw. 0.365) entspricht. Bei Berechnungen der Polymerentwicklung entlang der Trajektorien findet man auch gerade diese kritische Deborahzahl, der Spektralcode zeigt einen etwas niedrigeren Wert. Bei geeigneter Änderung der Parameter entsteht auf diesem Orbit der Fixpunkt, der dann die Stabilität bestimmt.



Abbildung 2.11: Exponenten der Zeitentwicklung des größten Wertes von tr \hat{c} abhängig von der Deborahzahl. Die Rechnungen wurden für zwei Gitterauflösungen ($32 \times 64 \times 64$ und $32 \times 128 \times 128$) durchgeführt. Die vertikale Linie zeigt den Lyapunovexponenten des periodischen Orbits, $\mu = 2.74$, an. ABC-Strömung mit n = 0, A = 1, B = 0.4, C = 0.6.



Abbildung 2.12: Periodischer Orbit in der Ebene x = 0 bei A = 1, B = 0.4, C = 0.6. In der unteren Ebene ist trĉ, berechnet mit dem Pseudospektralcode, dargestellt. Die darüberliegende Kurve zeigt den Verlauf des Orbits als Trajektorie, die Farbe zeigt dabei den lokalen Lyapunovexponenten an. Die Daten wurden jeweils auf die Farbskala [1, 10] abgebildet. Die senkrechten Linien dienen der besseren räumlichen Zuordnung und zeigen den Verlauf der Trajektorie zu äquidistanten Zeitpunkten.



Abbildung 2.13: Exponenten der Zeitentwicklung von tr \hat{c} für unterschiedliche Werte von C und der künstlichen Diffusivität κ am Punkt (0.304, 0.5, 0.5), dem Fixpunkt mit dem größten positiven Eigenwert $\mu_{max} = 3.63$ bei C = 0 (vertikale Linie). Der Exponent hebt sich auch für C > 0 bei De $\approx 1/\mu_{max}$ von null ab, obwohl dann an dieser Stelle kein Fixpunkt mehr existiert. ABC-Strömung mit n = 2, A = B = 1.



Abbildung 2.14: Exponenten der Zeitentwicklung des größten Wertes von tr \hat{c} für unterschiedliche Werte von C und der künstlichen Diffusivität κ . Die Exponenten sind für $C \leq 0.3$ nahezu unabhängig von C. Die kritische Deborahzahl ist auch für C > 0 der Kehrwert des größten Eigenwertes des Fixpunktes bei (0.304, 0.5, 0.5) mit C = 0, obwohl der bei C > 0 kein Fixpunkt mehr ist. ABC-Strömung mit n = 2, A = B = 1.

Für das in Anhang A.5 beschriebene System mit n = 2 verschwindet u in den Ebenen mit ganzzahligem x, es gibt also nicht mehr die ausgezeichneten Fixpunkte oder periodischen Orbits wie im obigen Fall. Bei den Parametern A = B = 1, C = 0.5 liegt die bei Berechnungen im Eulerbild bestimmte kritische Deborahzahl wie bei niedrigeren Werten für C bei etwa 0.28 (s. Abb. 2.14). Das entspricht auch hier dem Kehrwert des größten Eigenwertes eines Fixpunktes. Diese Fixpunkte liegen für A = B bei (y, z) = (1/2, 3/2) und beliebigem x. Die Eigenwerte sind $\eta = 3\pi A \cos \pi x \sin^2 \pi x$, das Maximum liegt bei $x = (\tan^{-1} \sqrt{2})/\pi \approx 0.304$ mit dem Wert 3.63A. Die Jacobimatrix ist bei diesen Punkten

$$\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, 1/2, 3/2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 \\ 0 & 0 & -\eta \end{pmatrix} .$$
 (2.22)

Die Oldroyd-B-Gleichungen geben dann für die Diagonalelemente des Konformationstensors

$$\dot{c}_{22} = \left(2\eta - \frac{1}{De}\right)c_{22} + \frac{1}{De}$$
 (2.23a)

$$\dot{c}_{33} = -\left(2\eta + \frac{1}{De}\right)c_{33} + \frac{1}{De}.$$
 (2.23b)

Als Lösung findet man

$$c_{22}(t) = \left(c_{22}(0) + \frac{De}{2\eta De - 1}\right) \exp\left[\left(2\eta - \frac{1}{De}\right)t\right] - \frac{De}{2\eta De - 1} \quad (2.24a)$$

$$c_{33}(t) = \left(c_{33}(0) - \frac{De}{2\eta De + 1}\right) \exp\left[-\left(2\eta + \frac{1}{De}\right)t\right] + \frac{De}{2\eta De + 1} (2.24b)$$

 c_{11} relaxiert von seinem Anfangswert auf seinen Gleichgewichtswert 1. Falls $2\eta - 1/De > 0$, wächst c_{22} asymptotisch exponentiell an, und es stellt sich kein Gleichgewicht ein. Im anderen Fall, $2\eta - 1/De < 0$, strebt die Spur von \hat{c} gegen den Gleichgewichtswert

tr
$$\hat{c}^{(eq)} = 1 - \frac{2}{(2\eta De)^2 - 1}$$
. (2.25)

Auch die Berechnungen mit einem Pseudospektralcode [42, 19] zeigen dieses Verhalten (Abb. 2.15). Unterhalb einer gewissen Deborahzahl läuft die Polymerlänge an dem entsprechenden Punkt in eine Sättigung, oberhalb dieser Deborahzahl findet man asymptotisch einen exponentiellen Anstieg². Unterhalb dieser Deborahzahl treten in bestimmten Bereichen auch sehr große Polymerlängen auf, die aber für größere Zeiten nicht exponentiell anwachsen. In diesen Bereichen wird die Entwicklung durch einen heteroklinen Orbit bestimmt.

²Die Deborahzahl, bei der der Übergang stattfindet, liegt allerdings bei dem Wert 1/η. Der ominöse Faktor 2 hat schon gelegentlich für Verwirrung gesorgt, vgl. Fußnote 3 auf Seite 17.



Abbildung 2.15: tr ĉ berechnet mit dem Pseudospektralcode für De = 0.2 (oben) und De = 0.3 (unten). Im oberen Bild treten die größten Polymerlängen im Bereich des heteroklinen Orbits bei (y = 1.5, z = 1.5) auf, im unteren dominieren die Fixpunkte bei (y = 0.5, z = 1.5). A = B =1, C = 0, künstliche Diffusivität $\kappa = 0.001$, t = 5.

Dieser heterokline Orbit liegt im Fall C = 0 zwischen zwei Fixpunkten in den Flächen mit x = 0 und x = 1 bei y = z = 1/2. Entlang dieses Orbits verschwinden u_y und u_z und es gilt $u_x = (A+B) \sin^3 \pi x$ und $\partial_x u_x = 3\pi (A+B) \cos \pi x \sin^2 \pi x$. Die Entwicklung der Polymerlänge entlang dieses heteroklinen Orbits kann man direkt berechnen. Die lokale Streckrate in x-Richtung an einem Ort x₀ führt auf einem Weg Δx über eine Zeit Δt zu einer Streckung um den Faktor

$$s_0 = \exp(\Delta t \partial_x u_x)|_{x=x_0} . \tag{2.26}$$

Für die Zeitspanne gilt $\Delta t \approx \Delta x/\partial_x u_x|_{x=x_0}$, aus dem Streckfaktor wird also

$$s_0 \approx \exp(\Delta x (\partial x u_x) / u_x)|_{x=x_0} = \exp(\Delta x \partial_x \log u_x)|_{x=x_0}.$$
 (2.27)

Die Streckung auf dem Weg von x_0 nach x_1 kann man als Produkt schreiben und den Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0$ durchführen

$$R(x_1) = R_0 \prod_{i=0}^{(x_1-x_0)/\Delta x} \exp(\Delta x \partial_x \log u_x)|_{x=x_0+i\Delta x}$$
(2.28a)

$$= R_0 \exp\left(\sum_{i} \Delta x \partial \log u_x|_{x=x_0+i\Delta x}\right)$$
(2.28b)

$$\longrightarrow_{\Delta x \to 0} \quad \mathsf{R}_0 \exp\left(\int_{x_0}^{x_1} \partial_x \log \mathfrak{u}_x dx\right) \tag{2.28c}$$

$$= \frac{R_0}{u_x(x_0)}u_x(x_1).$$
 (2.28d)

Falls die Streckung noch mit einer Relaxation konkurriert, wird aus (2.26)

$$s_0 = \exp\left(\Delta t \left(\partial_x u_x - \frac{1}{2De}\right)\right)\Big|_{x=x_0}$$
, (2.29)

was zu einem zusätzlichen Faktor

$$\exp\left(-\frac{1}{2\mathrm{De}}\int_{x_0}^{x_1}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{u}_x(x)}\right) \tag{2.30}$$

in (2.28d) führt.

Bei der betrachteten ABC-Strömung ohne Relaxation erreichen die Polymere bei x = 0.5 ihre maximale Länge bevor sie durch die Strömung wieder zusammengedrückt werden. Bei $R_0 = 1$ und Start bei x_0 ist die maximale Länge $R_{max} = 1/\sin^3 \pi x_0 \approx 1/(\pi x_0)^3$. Je kleiner x_0 ist, desto größer wird die maximale Länge. Da $\lim_{x\to 0} u_x = 0$, ist die maximale Länge nicht beschränkt.

Anders ist es im Fall mit Relaxation. Für sehr kleine x nimmt die Polymerlänge zunächst stark ab. Die Relaxationszeit bestimmt, ab welchem Wert für x die Polymerlänge wieder ansteigt. Dieser Wert gibt einen optimalen Startpunkt x_{opt} an, von dem aus im Verlauf die größte Polymerlänge erreicht wird. $\partial_x u_x(x_{opt}) = 1/(2De)$.



Abbildung 2.16: Entwicklung der Polymerlänge ohne Relaxation auf dem heteroklinen Orbit mit y = z = 1/2.



Abbildung 2.17: Entwicklung der Polymerlänge mit Relaxation auf dem heteroklinen Orbit mit y = z = 1/2.

53



Abbildung 2.18: Entwicklung der Polymerlänge auf dem heteroklinen Orbit mit y = z = 1/2. Die Länge relaxiert auf eine endliche Länge.

Berücksichtigt man, daß die Polymerlänge nicht gegen null sondern gegen eine endliche Länge strebt, so wird die bei x = 0.5 beobachtete Polymerlänge nach einiger Zeit konstant werden, da die Polymere, die weit unterhalb x_{opt} starten, alle in etwa mit der gleichen Länge dort ankommen.

Auf dem heteroklinen Orbit ist die Jacobimatrix des Geschwindigkeitsfelds diagonal. Deshalb lassen sich auch die Entwicklungen von Komponenten der Polymerorientierung in y- und z-Richtung einfach berechnen. Die dazu benötigten Ableitungen sind

$$\partial_{y}u_{y} = -\frac{A}{A+B}\partial_{x}u_{x}$$
 (2.31a)

$$\partial_z u_z = -\frac{B}{A+B} \partial_x u_x,$$
 (2.31b)

also proportional zu $\partial_x u_x$, so daß in (2.28a) nur ein Faktor -A/(A+B) bzw. -B/(A+B) im Exponenten hinzukommt. In (2.28d) erscheint dieser Faktor als Exponent zu den u_x . Die aus der Hinzunahme dieser Richtungen resultierenden Änderungen sind auf dem heteroklinen Orbit marginal.

Im integrablen Fall C=0 sind die meisten Trajektorien periodische Orbits. Die Polymere auf Trajektorien, die dem heteroklinen Orbit nahe kommen, zeigen qualitativ das gleiche Verhalten wie die Polymere auf dem heteroklinen Orbit selbst, allerdings nimmt die maximal erreichte Länge mit zunehmendem Abstand vom heteroklinen Orbit ab. Wenn die Trajektorien der Wand x = 1 nahekommen, laufen sie an der Wand entlang, um dann entlang des heteroklinen Orbits bei (3/2, 3/2) wieder zur gegenüberliegenden Wand und zum Ausgangspunkt zurückzukehren. Auf dem heteroklinen Orbit war nur die Ausdehnung des Polymers in x-Richtung von Bedeutung, in dem Bereich nahe den Wänden macht sich auch die Ausdehnung in die anderen Richtungen bemerkbar.

Bei sehr großen Relaxationszeiten nimmt die Polymerlänge in jedem Umlauf zu. Je näher die Trajektorie dem heteroklinen Orbit kommt, desto größer ist der Zuwachs pro Umlauf. Während eines Umlaufs kann die Länge um bis zu vier Größenordnungen variieren.

Bei sehr kleinen Relaxationszeiten ist die Länge auf dem Weg an der Wand entlang gleich der Gleichgewichtslänge. Entlang des heteroklinen Orbits nimmt sie zunächst stark zu und fällt dann sogar unter die Gleichgewichtslänge ab. Dieses Verhalten ändert sich auch quantitativ kaum mit dem Abstand vom heteroklinen Orbit.

Die großen Variationen in der Polymerlänge in der Umgebung des heteroklinen Orbits könnten als Instabilität fehlgedeutet werden. Bedenkt man aber, daß tatsächliche Polymere nicht beliebig in die Länge gezogen werden können, so besteht faktisch kein Unterschied zu einer wirklichen Instabilität.

2.4. Geometrische Eigenschaften der Trajektorien

Die Abbildungen 2.19 und 2.20 zeigen Histogramme der Krümmung und der Torsion von Trajektorien in der ABC-Strömung mit n = 0 bzw. n = 2. Beide Histogramme der Krümmung zeigen ein deutliches Maximum bei κ in der Größenordnung 1. Das Maximum für n = 0 liegt etwas höher. Die am häufigsten auftretenden Krümmungsradien sind also zwischen 0.3 und 1 bei n = 0 und zwischen 0.5 und 2 bei n = 2. Die Wahrscheinlichkeit für größere Krümmungen fällt in beiden Fällen stark ab.

Die Verteilung der Torsion zeigt für kleine τ eine nahezu konstante Wahrscheinlichkeit, die dann ab einem Wert, der in etwa dem Maximum des Histogramms der Krümmung entspricht, schnell abfällt.

Abb. 2.21 zeigt die gemeinsame Verteilung von Krümmung und lokalem Lyapunovexponenten. Die seltenen großen Krümmungen treten nur mit Lyapunovexponenten mit Betrag kleiner als 4 auf. Am häufigsten sind Krümmungen um 1 bei Lyapunovexponenten nahe Null.



Abbildung 2.19: Krümmung (oben) und Torsion (unten) der Trajektorien in der ABC-Strömung mit n = 0. Die Daten wurden entlang Trajektorienstücken gewonnen, die jeweils auf Gitterpunkten starten, Die Maschenweite des Gitters ist 0.02. A = B = 1.



Abbildung 2.20: Krümmung (oben) und Torsion (unten) der Trajektorien in der ABC-Strömung mit n = 2. Die Daten wurden entlang Trajektorienstücken gewonnen, die jeweils auf Gitterpunkten starten, Die Maschenweite des Gitters ist 0.02. A = B = 1.



Abbildung 2.21: Gemeinsame Verteilung von Krümmung und lokalen Lyapunovexponenten.

3. Niedrigdimensionales Modell einer Scherströmung

Wir betrachten eine Strömung in einem Volumen $\Omega = 2\pi d \times d \times \pi d$ mit periodischen Randbedingungen in x- und z-Richtung (stromabwärts und Spannweite) und frei gleitendem Fluid an den Begrenzungen in Scherrichtung (y):

$$\mathbf{u}_{\mathbf{y}}|_{\mathbf{y}=\pm 1} = \mathbf{0}, \qquad \left. \partial_{\mathbf{y}} \mathbf{u}_{\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{y}=\pm 1} = \left. \partial_{\mathbf{y}} \mathbf{u}_{\mathbf{z}} \right|_{\mathbf{y}=\pm 1} = \mathbf{0}.$$
(3.1)

Werden Längen in Einheiten von d/2 gemessen, so lassen sich die räumlichen Abhängigkeiten durch periodische Funktionen mit den Wellenzahlen $\alpha = 1/2$, $\beta = \pi/2$ bzw. $\gamma = 1$ in x-, y- bzw. z-Richtung darstellen. Die Strömung wird durch eine Volumenkraft

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \frac{\sqrt{2}\beta^2}{\mathrm{Re}}\sin(\beta\mathbf{y})\mathbf{e}_{\mathbf{x}}$$
(3.2)

angetrieben. Unter dieser Kraft bildet sich ein laminares Profil



Abbildung 3.1: Geometrie und laminares Profil der betrachteten Scherströmung. Die rot eingezeichneten Größen, die halbe Höhe d des Volumens in Scherrichtung und die Geschwindigkeit des laminaren Profils bei y = d/4, U_0 , werden für die Ableitung der dimensionslosen Gleichungen verwendet.

3. Niedrigdimensionales Modell einer Scherströmung

aus. Mit $U_0 = \boldsymbol{u}^{(1)}(\boldsymbol{y} = d/4)$ verwenden wir als Reynoldszahl

$$\operatorname{Re} = \frac{U_0 d}{2\nu} \,. \tag{3.4}$$

Die Reynoldszahl erscheint schon in der Definition der Kraft, um unabhängig von der Reynoldszahl immer das gleiche laminare Profil zu erhalten.

Das Geschwindigkeitsfeld wird aus dem laminaren Profil und acht weiteren Moden zusammengesetzt [47, 46, 48]. Die Modifikation des mittleren Profils

$$\mathbf{u}^{(9)} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}\sin(3\beta y) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(3.5)

mit der Wellenzahl 3β beschreibt in niedrigster Ordnung die Änderung des mittleren Profils durch die Fluktuationen der turbulenten Strömung. z-Abhängigkeiten der Strömungsgeschwindigkeit in x-Richtung entstehen aus der Advektion des Grundprofils durch Wirbel in Strömungsrichtung

$$\mathbf{u}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 + \beta^2}} \begin{pmatrix} 0\\ 2\gamma \cos(\beta y) \cos \gamma z\\ 2\beta \sin(\beta y) \sin \gamma z \end{pmatrix}.$$
 (3.6)

Diese z-Abhängigkeiten erscheinen als periodische Streifen (engl.: "streaks")

$$\mathbf{u}^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{4}{\sqrt{3}} \cos^2(\beta \mathbf{y}) \cos \gamma z \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \,. \tag{3.7}$$

Die y-Abhängigkeit erscheint hier in der Form $\cos^2 \beta y = (1 + \cos 2\beta y)/2$. Hier sind also zwei Fouriermoden zusammengefaßt worden. Die Advektion der Streifen mit der Wellenzahl 2 β durch die Wirbel in Strömungsrichtung mit Wellenzahl β führt auf die obige Modifikation des mittleren Profils mit der Summe dieser Wellenzahlen als Wellenzahl der y-Abhängigkeit. Als Instabilität dieser Streifen erscheint in diesem Modell eine Strömungsmode in Spannweitenrichtung

$$\mathbf{u}^{(4)} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \frac{4}{\sqrt{3}}\cos^2(\beta \mathbf{y})\cos\alpha \mathbf{x} \end{pmatrix}, \qquad (3.8)$$

die, advektiert durch die Streifen sowie durch Advektion der Streifen

$$(\mathbf{u}_4 \cdot \nabla)\mathbf{u}_2 \rightsquigarrow \mathbf{u}_6 \quad (x-Komponente)$$
 (3.9a)

$$(\mathbf{u}_2 \cdot \nabla)\mathbf{u}_4 \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{u}_6 \qquad (z\text{-Komponente}), \qquad (3.9b)$$

auf einen Wirbel in Scherrichtung führt:

$$\mathbf{u}^{(6)} = \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3(\alpha^2 + \gamma^2)}} \begin{pmatrix} -\gamma \cos(\alpha x) \cos^2(\beta y) \sin(\gamma z) \\ 0 \\ \alpha \sin(\alpha x) \cos^2(\beta y) \cos(\gamma z) \end{pmatrix}$$
(3.10)

Die Advektion dieser beiden Moden durch das laminare Profil führt auf

$$\mathbf{u}^{(5)} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ 2\sin(\beta \mathbf{y})\sin\alpha \mathbf{x} \end{pmatrix}$$
(3.11)

und

$$\mathbf{u}^{(7)} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\alpha^2 + \gamma^2}} \begin{pmatrix} \gamma \sin(\alpha x) \sin(\beta y) \sin(\gamma z) \\ 0 \\ \alpha \cos(\alpha x) \sin(\beta y) \cos(\gamma z) \end{pmatrix}$$
(3.12)

und schließlich eine dreidimensionale Mode, die aus der Advektion von \mathbf{u}_2 mit \mathbf{u}_5 (x-Komponente) und der Advektion von \mathbf{u}_3 mit \mathbf{u}_4 (y- und z-Komponenten) hervorgeht

$$\mathbf{u}^{(8)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{(\alpha^2 + \gamma^2)(\alpha^2 + \gamma^2 + \beta^2)}} \begin{pmatrix} 2\beta\alpha\sin(\alpha x)\sin(\beta y)\sin(\gamma z) \\ 2(\alpha^2 + \gamma^2)\cos(\alpha x)\cos(\beta y)\sin(\gamma z) \\ -2\beta\gamma\cos(\alpha x)\sin(\beta y)\cos(\gamma z) \end{pmatrix}.$$
(3.13)

Neben den genannten Zusammenhängen zwischen den Moden gibt es auch noch andere. Auch führen die Kopplungen zwischen den Moden auf Moden höherer Ordnung, die hier nicht berücksichtigt wurden. Tabelle 3.1 gibt einen Überblick über die vorhandenen Kopplungen.

Dieses Modell enthält einen sogenannten selbsterhaltenden Zyklus ("self-sustaining cycle"): Die Stromabwärtswirbel regen Streifen an. Die Instabilitäten dieser Streifen werden bei ihrem Zerfall wieder zu Stromabwärtswirbeln "recycled" [75, 47]. Ein derartiger Zyklus wurde auch von Brosa und Großmann [8] für die Rohrströmung vorgeschlagen.

Die Moden sind divergenzfrei und orthonormal in dem Sinn, daß

$$\int_{0}^{2\pi/\alpha} dx \int_{-\pi/2\beta}^{\pi/2\beta} dy \int_{0}^{2\pi/\gamma} dz \, \mathbf{u}^{(\mu)} \mathbf{u}^{(\nu)} = \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right) \left(\frac{\pi}{\beta}\right) \left(\frac{2\pi}{\gamma}\right) \, \delta_{\mu\nu} \,. \tag{3.14}$$

Mit diesen Moden wird das Geschwindigkeitsfeld geschrieben als

$$\mathbf{u} = \sum_{\nu=1}^{9} a^{(\nu)} \mathbf{u}^{(\nu)} \,. \tag{3.15}$$

Die zeitliche Entwicklung der Amplituden $a^{(\nu)}$ erhält man durch eine Galërkinprojektion. Dazu wird der obige Ansatz in die Navier-Stokes-Gleichung eingesetzt, mit **u**^(µ) 3. Niedrigdimensionales Modell einer Scherströmung

i∖j	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	-	_	_	5	4	7	6	*	_
2	_	_	_	6	7,8	4	5	5	_
3	2	1,9	_	7,8	6	5	4	4	2
4	_	6	7,8	_	_	2	3	3	_
5	_	7,8	6	_	_	3	2	2	_
6	_	*	5	*	3	*	*	*	_
7	_	*	4	3	*	*	*	*	_
8	6	*	4	3	*	1,9	*	*	6
9	_	_	_	5	4	7	6	*	_

Tabelle 3.1: Kopplungen im 9-Moden-Modell durch den Advektionsterm $(\mathbf{u}^{(i)} \cdot \nabla)\mathbf{u}^{(j)}$ (nach [47]). Kopplungen, die durch ein – bezeichnet sind, verschwinden exakt. Die Ziffern bezeichnen die berücksichtigten Kopplungen: $(\mathbf{u}^{(i)} \cdot \nabla)\mathbf{u}^{(j)}$ trägt zur Mode $\mathbf{u}^{(k)}$ bei, wenn in der Tabelle an der entsprechenden Stelle die Ziffer k steht. Alle anderen Kopplungen werden nicht berücksichtigt.

multipliziert und über das Volumen integriert. Man erhält einen Satz von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Amplituden [47].

$$\partial_{\mathbf{t}} \mathbf{u} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nabla \mathbf{p} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta \mathbf{u} + \mathbf{F}$$
 (3.16a)

$$\longrightarrow \partial_{t} a^{(\mu)} = \sum_{\nu \rho} N^{(\mu)}_{\nu \rho} a^{(\nu)} a^{(\rho)} - \frac{1}{Re} \kappa^{2}_{\mu} a^{(\mu)} + f^{(\mu)}$$
(3.16b)

Die $N_{\nu\rho}^{(\mu)}$ entsprechen den Einträgen in Tab. 3.1. Die κ_{μ}^2 sind die Wellenzahlen der einzelnen Moden. Falls in jeder Richtung nur eine Wellenzahl auftritt, sind es auch die Eigenwerte des Laplace-Operators (vgl. Tab. 3.2).

3.1. Wirbel-Streifen-Wechselwirkung

Bei der Advektion des Grundprofils $\mathbf{u}^{(1)}$ durch die stromabwärtsgerichteten Wirbel $\mathbf{u}^{(3)}$ werden Streifen angeregt. Die Dynamik im Unterraum von Wirbel und Streifen wird durch

$$\begin{pmatrix} \dot{a}^{(2)} \\ \dot{a}^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\kappa_2^2/\text{Re} & \sqrt{3/(2\kappa_3^2)}\beta\gamma a^{(1)} \\ 0 & -\kappa_3^2/\text{Re} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(2)} \\ a^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_2 & S \\ 0 & -\lambda_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(2)} \\ a^{(3)} \end{pmatrix}$$
(3.17)

beschrieben. Die Eigenvektoren dieser Matrix sind

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
 und $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \frac{S}{\lambda_2 - \lambda_3} \\ 1 \end{pmatrix}$. (3.18)
3.1. Wirbel-Streifen-Wechselwirkung



Tabelle 3.2: Wellenzahlen der Geschwindigkeitsmoden



Abbildung 3.2: Zeitlicher Verlauf der Amplitude des Streifens $a^{(2)}$ bei Anregung des Wirbels mit $a^{(3)}(0) = 1$ abhängig von γ bei Re = 20 im linearen System (3.17).



Abbildung 3.3: Zeitliches Maximum der Streifenamplitude bei Anregung des Wirbels abhängig von γ . Das Maximum dieser Kurve zeigt die optimale Wellenzahl $\gamma_{opt} \approx 1.1670$ für die Wirbel-Streifen-Wechselwirkung. Die Lage des Maximums dieser Kurve ist ist unabhängig von Re.



Abbildung 3.4: Abhängigkeit des Maximums der Streifenamplitude von der Wellenzahl γ und der Anfangsamplitude $a^{(3)}(0)$ im vollen System. In der Darstellung wurden die Amplituden auf $a^{(3)}(0) = 0.1$ normiert. Die vertikale Linie zeigt γ_{opt} aus dem linearen System an. Re = 100.

3.2. Erweiterung zur viskoelastischen Scherströmung

Ein Anfangswert in Richtung von **s** zerfällt mit der Zeitkonstanten λ_2 , während ein Anfangswert in Richtung **w** mit λ_3 zerfällt. Hier ist $\lambda_2 > \lambda_3$, und die Streifen zerfallen schneller als die Wirbel. Die beiden Eigenvektoren sind nicht orthogonal, so daß wegen der unterschiedlichen Zeitkonstanten die Energie im Verlauf größer als die Energie des Anfangszustands werden kann (sogenannte *nichtnormale Verstärkung*) [60]. Als Lösungen der Gleichungen findet man

$$\begin{pmatrix} a^{(2)}(t) \\ a^{(3)}(t) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} e^{-\lambda_2 t} \\ 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} \frac{S}{\lambda_2 - \lambda_3} (e^{-\lambda_3 t} - e^{-\lambda_2 t}) \\ e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix} .$$
 (3.19)

A und B sind dabei die Amplituden von Streifen bzw. Wirbel bei t = 0.

Die nichtnormale Verstärkung ist ein wesentliches Phänomen beim Übergang von laminarem Fluß zur Turbulenz [6, 31]. Trotz der linearen Stabilität des laminaren Zustands, die eigentlich einen exponentiellen Zerfall von Störungen erwarten läßt, können kleine Störungen anwachsen. Dieses Anwachsen kann so stark werden, daß die Nichtlinearität der Navier-Stokes-Gleichung nicht mehr vernachlässigbar ist – die andere wichtige Zutat zum Turbulenzübergang.

Die Energieübertragung zwischen Wirbel und Streifen hängt geometrisch nur von der Größe der Querschnittsfläche in Scher- und Spannweitenrichtung, also von der Wellenzahl γ ab. Die optimale Wellenzahl γ_{opt} ist das γ , bei dem das zeitliche Maximum der Streifenkomponente im zweiten Term der Lösung am größten wird. Das zeitliche Maximum liegt bei

$$t_{\max} = \frac{\log \lambda_3 - \log \lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2} \,. \tag{3.20}$$

Abb. 3.2 zeigt den Zeitverlauf der Streifenamplitude $a^{(2)}$ abhängig von γ . In Abb. 3.3 sind die zeitlichen Maxima von $a^{(2)}$ abhängig von γ für verschiedene Reynoldszahlen dargestellt. Die optimale Wellenzahl ist unabhängig von Re und beträgt $\gamma_{opt} \approx 1.1670$. Der Wert des Maximums ist proportional zu Re und zu $a^{(2)}(0)$.

In Abb. 3.4 ist die größte Streifenamplitude, die im Verlauf im vollen System erreicht wird, dargestellt. $a^{(1)}$ und $a^{(9)}$ sind dabei nicht mehr konstant gehalten. Bei t = 0 sind alle Amplituden bis auf $a^{(3)}$ auf ihrem Gleichgewichtswert. Bei kleinen Anfangsamplituden $a^{(3)}(0)$ entspricht der Verlauf dem in Abb. 3.3 dargestellten, bei größeren Anfangsamplituden weicht der Verlauf immer mehr ab.

3.2. Erweiterung zur viskoelastischen Scherströmung

Zusätzlich zum newtonschen Spannungstensor wird nun ein Polymerspannungstensor in die Navier-Stokes-Gleichung eingefügt. Polymerspannungstensor steht zu dem

Konformationstensor in der Beziehung (vgl. (1.87))

$$\tau_{ij}^{p} = \frac{s}{\text{De Re}} (c_{ij} - \delta_{ij}) . \qquad (3.21)$$

Die Deborahzahl sei hier mit der Relaxationszeit der Polymere λ_H definiert durch

$$De = \frac{U_0 \lambda_H}{d/2}.$$
 (3.22)

Der Konformationstensor soll wie das Geschwindigkeitsfeld in Moden entwickelt werden. Die zeitliche Entwicklung des Konformationstensors wird hier durch das Oldroyd-B-Modell beschrieben (vgl. (1.89))

$$\partial_{t}c_{ij} = -u_{k}\partial_{k}c_{ij} + c_{ik}\partial_{k}u_{j} + c_{kj}\partial_{k}u_{i} - \frac{1}{De}(c_{ij} - \delta_{ij}). \qquad (3.23)$$

Als Mode 0. Ordnung nehmen wir die Gleichgewichtslage δ_{ij} . Setzt man diese für \hat{c} in die rechte Seite der Oldroyd-B-Gleichung ein, so tritt der Term $(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$ auf, der einen Satz von Polymermoden passend zu den Geschwindigkeitsmoden nahelegt. Zu jeder Geschwindigkeitsmode $\mathbf{u}^{(\nu)}$ konstruieren wir also eine Gradientenmode $G_{ij}^{(\nu)} = (\partial_i u_j^{(\nu)} + \partial_j u_i^{(\nu)})$ und schreiben den Konformationstensor als

$$\hat{c} = \hat{\delta} + \sum_{\gamma=1}^{9} g^{(\gamma)} \hat{G}^{(\gamma)}.$$
 (3.24)

Der Polymerspannungstensor hat dann die Form

$$\hat{\tau}^{p} = \frac{s}{\text{De Re}} \sum_{\nu=1}^{9} g^{(\nu)} \hat{G}^{(\nu)} .$$
 (3.25)

Wie bei den Amplituden der Geschwindigkeitsmoden erhält man die zeitliche Entwicklung durch eine Galërkinprojektion – hier durch Einsetzen in die Oldroyd-B-Gleichung. Die zeitliche Entwicklung der Amplituden dieser Moden ist von der Form

$$\partial_{t} a^{(\nu)} = f^{(\nu)} + \sum_{\mu \rho} N^{(\nu)}_{\mu \rho} a^{(\mu)} a^{(\rho)} - \frac{1}{Re} \kappa_{\nu}^{2} a^{(\nu)} - \frac{s}{De Re} \frac{\kappa_{\nu}}{\sqrt{2}} g^{(\nu)} \quad (3.26a)$$

$$\partial_{t}g^{(\nu)} = \sqrt{2}\kappa_{\nu}a^{(\nu)} - \frac{1}{De}g^{(\nu)} + \sum_{\mu\rho}A^{(\nu)}_{\mu\rho}a^{(\mu)}g^{(\rho)}. \qquad (3.26b)$$

Die $\kappa^{(\nu)}$ und die $N^{(\nu)}_{\mu\rho}$ sind die gleichen wie in (3.16b). Die $A^{(\nu)}_{\mu\rho}$ sind die Kopplungen durch die Advektionsterme in der Oldroyd-B-Gleichung

$$A_{\mu\rho}^{(\nu)} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} d\mathbf{x} (-(u_k^{(\mu)} \partial_k) G_{ij}^{(\rho)} + (\partial_k u_i^{(\mu)}) G_{kj}^{(\rho)} + G_{ik}^{(\rho)} \partial_k u_j^{(\mu)}) G_{ij}^{(\nu)}.$$
(3.27)

$$\begin{split} \text{Geschwindigkeitsfeld} & \text{Polymerfeld} \\ \mathbf{u} &= \sum_{\nu=1}^{9} \alpha^{(\nu)} \mathbf{u}^{(\nu)} & \hat{\tau} &= \sum_{\nu=1}^{9} g^{(\nu)} \hat{G}^{(\nu)} \\ & \mathbf{u}^{(\nu)} & \\ & \hat{G}^{(\nu)} &= \frac{1}{N_{\nu}} \left(\nabla \mathbf{u}^{(\nu)} + (\nabla \mathbf{u}^{(\nu)})^{\dagger} \right) \end{split}$$

$$\mathbf{u}^{(1)} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}\sin(\pi y/2) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\mathbf{G}}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \cos(\pi y/2) & 0 \\ \cos(\pi y/2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\int |\mathbf{u}^{(\nu)}|^2 d\mathbf{x} = \frac{8\pi^2}{\alpha\gamma} \qquad \qquad \int |\hat{\mathbf{G}}^{(\nu)}|^2 d\mathbf{x} = \frac{8\pi^2}{\alpha\gamma}$$

Tabelle 3.3: Konstruktion der Polymermoden aus den Geschwindigkeitsmoden.

$\rho \setminus \mu$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1			2	5	4	7	6	6	
2			1,9	6	7,8	4	5	5	
3	2	1,9		7,8	6	5	4	4	2
4	5	6	7,8			2	3	3	5
5	4	7,8	6			3	2	2	4
6	7	4	5	2	3			1,9	7
7	6	5	4	3	2				6
8	6	5	4	3	2	1,9			6
9			2	5	4	7	6	6	

Tabelle 3.4: Kopplungen der Form $A_{\mu\rho}^{(\nu)}a^{(\mu)}g^{(\rho)}$. Die Amplitude $g^{(\rho)}$ trägt zusammen mit $a^{(\mu)}$ zu $g^{(\nu)}$ bei. ρ ist die Zeile, μ die Spalte, die Einträge geben ν an.

Die Indexkombinationen, bei denen $A_{\mu\rho}^{(\nu)}$ nicht verschwindet, sind in Tab. 3.4 angegeben.

Die "Gleichgewichtsmode" δ_{ij} wurde nicht mit einer Amplitude versehen. Diese Amplitude würde mit der Zeitkonstanten De gegen 1 streben. Da die Geschwindigkeitsmoden divergenzfrei sind, tritt auch keine Wechselwirkung mit den Geschwindigkeitsmoden auf.

Bei der Beschränkung auf diese Moden werden natürlich eine Reihe von Kopplungen nicht berücksichtigt. Als einen Satz von neun weiteren Moden kann man die Moden

$$C_{ij}^{(\nu)} = -u_k^{(\nu)} \partial_k G_{ij}^{(\nu)} + G_{ik}^{(\nu)} \partial_k u_j^{(\nu)} + G_{kj}^{(\nu)} \partial_k u_i^{(\nu)}$$
(3.28)

ansetzen. Für ein kleines Untersystem wurde das auch durchgeführt. Bei den "einfachen" Moden $\mathbf{u}^{(1)}$, $\mathbf{u}^{(2)}$, $\mathbf{u}^{(3)}$ und $\mathbf{u}^{(9)}$ erhält man exakte Ergebnisse, wenn nur eine dieser Geschwindigkeitsmoden angeregt wird. Werden mehrere Moden angeregt, sind noch weitere Moden zur exakten Beschreibung notwendig. Die Moden $C_{ij}^{(\nu)}$ liefern innerhalb des Modensatzes keinen direkten Beitrag zur Navier-Stokes-Gleichung. Deshalb wurde hier auf diese Moden verzichtet, zumal sie nicht orthogonal sind und so das System sehr komplex machen würden.

Da die Divergenz der Geschwindigkeitsmoden verschwindet, verschwindet auch die Spur der Gradientenmoden. Aus diesen Moden läßt sich also nicht auf die Länge der Polymere zurückschließen.

3.2.1. Renormierung der Reynoldszahl

Die Rückwirkung der Gradientenmoden $\hat{G}^{(\nu)}$ auf die Strömung ergibt in der Navier-Stokes-Gleichung einen Term der Art $\partial_{jj}u_i^{(\nu)}$, der mit der newtonschen Reibung zusammengefaßt werden kann. Der gesamte Spannungstensor führt auf den Dissipationsterm

$$\frac{1}{\operatorname{Re}} \left(a^{(\nu)} \Delta u^{(\nu)} + \frac{s}{\operatorname{De}} g^{(\nu)} \operatorname{div} G^{(\nu)} \right) = -\frac{1}{\operatorname{Re}} \left(\kappa_{\nu}^{2} a^{(\nu)} + \frac{s}{\operatorname{De}} \frac{\kappa}{\sqrt{2}} g^{(\nu)} \right) (3.29a)$$
$$= -\frac{1}{\operatorname{Re}} \left(\tilde{a}^{(\nu)} + s \tilde{g}^{(\nu)} \right) u^{(\nu)} \qquad (3.29b)$$

mit $\tilde{a}^{(\nu)} = \kappa_{\nu}^2 a^{(\nu)}$ und $\tilde{g}^{(\nu)} = \kappa_{\nu}/(\sqrt{2} De) g^{(\nu)}$. Das führt zu einer neuen Gleichgewichtsamplitude des laminaren Grundprofils

$$a_{\rm eq}^{(1)} = \frac{1}{1+s} \,. \tag{3.30}$$

Um Ergebnisse bei unterschiedlichen s miteinander vergleichen zu können, wird die Reynoldszahl im viskosen Spannungstensor so renormiert, daß sich für alle s jeweils das gleiche laminare Grundprofil

$$a_{eq}^{(1)} = 1$$
 mit $g_{eq}^{(1)} = \sqrt{2}\kappa_1 De$ (3.31)



Abbildung 3.5: Mittelwerte der Abweichungen vom newtonschen Spannungstensor $(\tilde{g} - \tilde{a})$ abhängig von dem Konzentrationsparameter s. Re = 400, De = 1.2.

als Gleichgewichtslage ergibt. Die Navier-Stokes-Gleichung lautet dann

$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1-s}{Re} \Delta \mathbf{u} + \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} + \mathbf{F}.$$
 (3.32)

Bei dieser Renormierung bleibt der Energieeintrag durch die Kraft $\epsilon_{in} = \langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{F} \rangle$ und die Gesamtdissipation im laminaren Profil unabhängig von s. Lediglich die Aufteilung zwischen viskoser und polymerischer Dissipation wird durch den Parameter s verändert. Der Spannungstensor wird dann zu

$$-\frac{1}{\text{Re}}((1-s)\tilde{a}^{(\nu)} + s\tilde{g}^{(\nu)}). \qquad (3.33)$$

Das kann man umschreiben zu

$$-\frac{1}{\text{Re}}(\tilde{a}^{(\nu)} + s(\tilde{g}^{(\nu)} - \tilde{a}^{(\nu)})). \qquad (3.34)$$

Der Unterschied der Dissipation zwischen dem newtonschen und dem viskoelastischen Fall ist also durch den Term

$$s(\tilde{g}^{(\nu)} - \tilde{a}^{(\nu)}) \tag{3.35}$$

gegeben. Bei kleiner Deborahzahl bleibt auch diese Differenz klein, da $\tilde{g}^{(\nu)}$ der Geschwindigkeitsamplitude $\tilde{a}^{(\nu)}$ nahezu ohne Verzögerung folgt. In diesem Fall verhält



Abbildung 3.6: Mittelwerte der Abweichungen vom newtonschen Spannungstensor $(\tilde{g}^{(\nu)} - \tilde{a}^{(\nu)})$ abhängig von der Deborahzahl. Nur die Moden $\nu = 1$ und $\nu = 9$ zeigen deutlich einen steigenden Trend. Diese beiden Moden zeigen auch deutlich asymmetrische Verteilungen (unten), während die Verteilungen zu den anderen ν fast symmetrisch um 0 sind. Re = 400, s = 0.4.



Abbildung 3.7: Varianzen der Abweichungen vom newtonschen Spannungstensor $(\tilde{g}^{(\nu)} - \tilde{a}^{(\nu)})$ abhängig von der Deborahzahl. Alle Varianzen nehmen mit der Deborahzahl zu. Re = 400, s = 0.4.

sich das Fluid wie das newtonsche Fluid. Bei größerer Deborahzahl wird die Polymeramplitude träger, die Differenzen werden größer (s. Abb. 3.5–3.7). Dann sind deutliche Änderungen gegenüber dem newtonschen Fall zu erwarten.

Eine andere Möglichkeit, um eine von s unabhängige Gleichgewichtslage des laminaren Grundprofils zu erhalten, ist eine Renormierung der Kraft. Mit diesem Ziel wurde schon die Reynoldszahl in die Kraft aufgenommen. Wenn man die Kraft zusätzlich noch mit (1 + s) multipliziert, erhält man auch wieder (3.31) als Gleichgewichtslage,

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \frac{\sqrt{2}\beta^2}{\mathrm{Re}}(1+\mathrm{s})\sin(\beta\mathbf{y})\mathbf{e}_{\mathrm{x}}.$$
 (3.36)

Auf diese Weise wird die zusätzliche Energiedissipation der Polymere durch eine stärkere Kraft kompensiert.



Abbildung 3.8: $a_{max}^{(2)}(\gamma)$ beim Start vom laminaren Profil mit Stromabwärtswirbel $a^{(3)}(0) = 0.01$. Re = 100 und s = 0.5 sind jeweils konstant, De wird variiert. Das Maximum verschiebt sich bei steigendem De leicht zu höheren Wellenzahlen. Der senkrechte Pfeil zeigt die optimale Wellenzahl im newtonschen Fall.



Abbildung 3.9: $a_{max}^{(2)}(\gamma)$ beim Start vom laminaren Profil mit Stromabwärtswirbel $a^{(3)}(0) = 0.01$. Re = 100 und De = 1.0 sind konstant, s wird variiert. γ_{opt} steigt leicht an bei steigendem s. Der senkrechte Pfeil zeigt die optimale Wellenzahl im newtonschen Fall.



Abbildung 3.10: $a_{max}^{(2)}(\gamma) \cdot 100/\text{Re}$ beim Start vom laminaren Profil mit Stromabwärtswirbel $a^{(3)}(0) = 0.01$. De und s sind konstant, Re wird variiert. Die optimale Wellenzahl ändert sich nicht mit Re.

3.2.2. Wirbel-Streifen-Wechselwirkung

Wie in 3.1 tritt auch im viskoelastischen Fall eine Anregung der Streifen durch die Stromabwärtswirbel auf. Die Dynamik im Unterraum wird hier durch

$$\begin{pmatrix} \dot{a}^{(2)} \\ \dot{g}^{(2)} \\ \dot{a}^{(3)} \\ \dot{g}^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{(1-s)\kappa_2^2}{Re} & -\frac{s}{De\,Re}\frac{\kappa_2}{\sqrt{2}} & -\frac{\sqrt{3/2}\beta\gamma}{\kappa_3}a^{(1)} & 0 \\ \sqrt{2}\kappa_2 & -1/De & \frac{\sqrt{3}\beta^2\gamma}{\kappa_2\kappa_3}g^{(1)} & \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\beta\gamma(\beta^2+3\gamma^2)}{\kappa_2\kappa_3}a^{(1)} \\ 0 & 0 & -\frac{(1-s)\kappa_3^2}{Re} & -\frac{s}{De\,Re}\frac{\kappa_3}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\kappa_3 & -1/De \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(2)} \\ g^{(2)} \\ a^{(3)} \\ g^{(3)} \end{pmatrix}$$
(3.37)

beschrieben. Die Eigenwerte dieser Matrix sind

$$\lambda_{1,2} = -\frac{(1-s)\operatorname{De}\kappa_2^2 + \operatorname{Re}}{2\operatorname{De}\operatorname{Re}} \pm \sqrt{\left(\frac{(1-s)\operatorname{De}\kappa_2^2 + \operatorname{Re}}{2\operatorname{De}\operatorname{Re}}\right)^2 - \frac{\kappa_2^2}{\operatorname{De}\operatorname{Re}}} (3.38a)$$

$$\lambda_{3,4} = -\frac{(1-s)\operatorname{De}\kappa_3^2 + \operatorname{Re}}{2\operatorname{De}\operatorname{Re}} \pm \sqrt{\left(\frac{(1-s)\operatorname{De}\kappa_3^2 + \operatorname{Re}}{2\operatorname{De}\operatorname{Re}}\right)^2 - \frac{\kappa_3^2}{\operatorname{De}\operatorname{Re}}} (3.38b)$$

 γ_{opt} verschiebt sich ein wenig zu größeren Wellenzahlen bei Erhöhung von De bzw. s. Bei Änderung der Reynoldszahl bleibt γ_{opt} konstant. Insgesamt sind die Veränderungen der optimalen Wellenzahl kleiner als 10%. Anders als bei Sureshkumar et. al [69],



Abbildung 3.11: Maximale Streifenamplitude beim Start vom laminaren Profil mit einer Anfangsstörung in $g^{(3)}$. Bei hohen Deborahzahlen erscheint noch ein weiteres Maximum bei größeren Wellenzahlen. Der Pfeil zeigt die optimale Wellenzahl im newtonschen Fall. Re = 100, s = 0.5, $g^{(3)}(0) = 0.1$.

die in direkter numerischer Simulation einer turbulenten Kanalströmung eine Verbreiterung der Strukturen in Spannweitenrichtung beobachtet haben, erweisen sich hier schmalere Strukturen als optimal.

Startet man mit einer Störung nur in der Polymeramplitude $g^{(3)} \neq g_{eq}^{(3)}$, so hängt die optimale Wellenzahl deutlich von De ab (Abb. 3.11). Für kleine De hat sie einen Wert von ca. 1.69 und nimmt mit steigender Deborahzahl ab. Für große Deborahzahlen tritt noch ein weiteres Maximum bei höheren Wellenzahlen auf, das bei De ≈ 30 größer als das erste Maximum bei kleineren Wellenzahlen wird.

Beim Start von $g^{(3)}(0) = \sqrt{2}\kappa_3 \text{ De } a^{(3)}(0)$, dem Gleichgewichtswert von $g^{(3)}$ zu $a^{(3)}(0)$, ergeben sich nur geringfügige Veränderungen gegenüber dem Fall $g^{(3)}(0) = 0$.

3.3. Geometrische Eigenschaften der Trajektorien

In der viskoelastischen Taylor-Couette-Strömung können elastische, also nur durch die zugesetzten Polymere erzeugte Instabilitäten auftreten [49, 44, 54, 62]. Fluktuationen der Geschwindigkeit können dabei Polymere in einer Weise auslenken, daß sie Ringspannungen erzeugen, die die ursprüngliche Geschwindigkeitsfluktuation verstärken. Für diese Art von Instabilitäten ist die Krümmung der Stromlinien des la-



Abbildung 3.12: Krümmung im laminaren Grundprofil mit einer kleinen Komponente des Stromabwärtswirbels **u**⁽³⁾.

minaren Grundprofils ein wesentliches Kriterium. Hier soll nun die Krümmung der Trajektorien in dem Modell der Scherströmung untersucht werden.

Das Geschwindigkeitsfeld im 9-Moden-Modell ist gegeben durch¹

$$\mathbf{u}(\mathbf{t}) = \mathbf{a}^{(\mathbf{v})}(\mathbf{t})\mathbf{u}^{(\mathbf{v})}. \tag{3.39}$$

Die Zeitableitungen sind

$$\dot{\mathbf{u}} = \dot{\mathbf{a}}^{(\nu)} \mathbf{u}^{(\nu)} + \mathbf{a}^{(\nu)} \mathbf{a}^{(\mu)} \mathbf{u}^{(\nu)} \cdot \nabla \mathbf{u}^{(\mu)}$$
(3.40a)

$$\ddot{\mathbf{u}} = \ddot{\mathbf{a}}^{(\nu)} \mathbf{u}^{(\nu)} + \dot{\mathbf{a}}^{(\nu)} \mathbf{a}^{(\mu)} \mathbf{u}^{(\nu)} \cdot \nabla \mathbf{u}^{(\mu)} + 2\mathbf{a}^{(\nu)} \dot{\mathbf{a}}^{(\mu)} \mathbf{u}^{(\nu)} \cdot \nabla \mathbf{u}^{(\mu)}$$
(3.40b)

$$+a^{(\nu)}a^{(\mu)}a^{(\rho)}\mathbf{u}^{(\nu)}\cdot\nabla(\mathbf{u}^{(\mu)}\cdot\nabla\mathbf{u}^{(\rho)})$$

Die Abbildungen 3.12 bis 3.14 zeigen die Krümmung der Trajektorien im laminaren Grundprofil mit jeweils einer kleinen Komponente der anderen Geschwindigkeitsmoden. Bei den Moden $\mathbf{u}^{(3)}$, $\mathbf{u}^{(4)}$ und $\mathbf{u}^{(5)}$ treten um y = 0 große Krümmungen auf. In diesem Bereich ist der Beitrag des laminaren Profils klein und überlagert nicht die große Krümmung, die in diesen Moden enthalten ist.

Abbildung 3.15 zeigt Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Krümmung im turbulenten Zustand und während des Zerfalls zum laminaren Profil. Im turbulenten Zustand

¹Hier gelte die Summenkonvention für die oberen Indizes der Moden und Amplituden.



 $\begin{array}{c}
0 \\
-4 \\
-8 \\
-12 \\
0\pi \\
1\pi \\
x \\ 2\pi \\
3\pi \\
4\pi \\
-1,0
\end{array}$

Abbildung 3.13: Krümmung im laminaren Grundprofil mit einer kleinen Komponente von $\mathbf{u}^{(4)}$ (oben) bzw. $\mathbf{u}^{(5)}$ (unten).



Abbildung 3.14: Krümmung im laminaren Grundprofil mit einer kleinen Komponente von **u**⁽⁶⁾ (oben) bzw. **u**⁽⁷⁾ unten.



Abbildung 3.15: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Krümmung κ in der Scherströmung. Die Histogramme sind aus den Daten auf einem Gitter von $100 \times 98 \times 49$ Punkten gewonnen worden. Bei t = 0 befindet sich das System im turbulenten Zustand. Die Verteilung hat ein Maximum bei etwa 0.1. In der Zerfallsphase wird die Verteilung breiter, und das Maximum bewegt sich zu kleineren Krümmungen hin. Oberhalb des Maximums fällt die Krümmung mit einem Exponenten von etwa -1.4 ab. Bei t = 4100 ist der turbulente Zustand fast vollständig zerfallen, um y = 0 bleibt aber noch eine Restbewegung mit sehr großen Krümmungen bestehen. Re = 400, De = 1, s = 0.1.



Abbildung 3.16: Zeitverlauf der Verteilungen der Krümmung in der Scherströmung.

hat die Verteilung ein Maximum bei etwa 0.1. Das Maximum und die Verteilung verändert sich im Verlauf etwas, je nachdem, welche Strukturen im turbulenten Zustand gerade dominieren (s. auch Abb. 3.16).

Im ungestörten laminaren Profil sind alle Stromlinien parallel zur x-Achse, und die Krümmung verschwindet überall (in der Ebene y = 0 verschwindet die Geschwindigkeit, dort ist die Krümmung nicht definiert).

Beim Zerfall des turbulenten Zustandes wird die Verteilung der Krümmung immer breiter und spaltet sich – wegen der endlichen Auflösung des Gitters – in zwei Teile. Der Teil bei sehr kleinen Krümmungen entspricht den fast verschwindenden Krümmungen des nur leicht gestörten laminaren Profils. Der Teil bei sehr großen Krümmungen gehört zu den noch vorhandenen Störungen des laminaren Profils, die um y = 0 eine zwar sehr langsame, aber dennoch nicht verschwindende Bewegung bewirken (vgl. Abb. 3.12 bis 3.14).

Die Überlegungen in Abschnitt 1.2.5 zeigen, daß in der voll entwickelten Turbulenz die Energiedissipation im wesentlichen in den kleinskaligen Wirbeln passiert, während große Wirbel kaum viskose Dämpfung erfahren. Die Stromlinien kleiner Wirbel zeigen große Krümmungen, also könnte man einen Zusammenhang zwischen der Krümmung der Trajektorien und der lokalen Energiedissipationsrate erwarten.

Abb. 3.17 zeigt gemeinsame Verteilungen von Krümmung der Trajektorien und lokaler Energiedissipationsrate

$$\epsilon_{\rm loc} = \frac{1}{2} \nu \sum_{ij} (\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2$$
(3.41)

im turbulenten Zustand zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die Verteilungen zeigen



Abbildung 3.17: Gemeinsame Verteilungen der Krümmung der Trajektorien und der lokalen Energiedissipationsrate im turbulenten Zustand zu unterschiedlichen Zeitpunkten (Ausschnitt). Re = 400, De = 1.5, s = 0.3.

zwar einige gemeinsame Eigenschaften (Konzentration um $\epsilon_{loc} \approx 0.2$ und $\kappa \approx 0.2$, größere ϵ_{loc} treten meist mit $\kappa < 1$ auf), unterscheiden sich aber im einzelnen doch beträchtlich. Ein einfacher oder gar linearer Zusammenhang läßt sich so nicht erkennen.

3.3.1. Krümmung und Energiedissipation beim Stromabwärtswirbel

Die gleichmäßig rotierende Bewegung ist reibungsfrei. Deshalb darf der viskose Spannungstensor nur aus symmetrischen Kombinationen der Ableitungen bestehen. Wenn der Krümmungsradius in Richtung des Normalenvektors linear mit der Steigung -1abnimmt, und gleichzeitig die Winkelgeschwindigkeit konstant ist, liegt lokal die gleichmäßige Rotation vor, und es tritt in der Ebene keine Energiedissipation auf.

Bei Wirbeln wie dem Stromabwärtswirbel (vgl. (3.6))

$$\mathbf{u}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 + \beta^2}} \begin{pmatrix} 0\\ 2\gamma \cos(\beta y) \cos \gamma z\\ 2\beta \sin(\beta y) \sin \gamma z \end{pmatrix}.$$
 (3.42)

liegt bei gleichen Wellenzahlen $\beta = \gamma$ in der Umgebung der Wirbelmittelpunkte die-



Abbildung 3.18: Lokale Energiedissipationsrate ϵ_{loc} (oben) und $(\kappa u)^2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \rho + 1)$ (unten) für den Stromabwärtswirbel (3.42) des 9-Moden-Modells. Auf den Diagonalen stimmen beide gut überein. Hier ist die lokale Winkelgeschwindigkeit κu konstant.

ser Fall der gleichmäßigen Rotation vor. Die lokale Energiedissipation

$$\epsilon_{\rm loc} = 8\nu\beta^2 a^{(3)^2} \sin^2\beta y \cos^2\beta z \qquad (3.43)$$

verschwindet in der Umgebung der Wirbelmittelpunkte. Auf den Diagonalen von den Wirbelmittelpunkten zu den Ecken des Periodizitätsbereichs ist die lokale Winkelgeschwindigkeit ku konstant, der Krümmungsradius nimmt aber nicht linear zu wie es bei einer gleichmäßigen Rotation der Fall wäre. Die Änderung des Krümmungsradius in Richtung des Normalenvektors zeigt auf diesen Diagonalen den gleichen Verlauf wie die Energiedissipation. Abb.3.18 zeigt hier eine gute Übereinstimmung zwischen

$$(\kappa \mathbf{u})^2 (\mathbf{n} \cdot \nabla \rho + 1) = \mathbf{u}^2 (-\mathbf{n} \cdot \nabla \kappa + \kappa^2)$$
(3.44)

und ϵ_{loc} . Außerhalb der Diagonalen nimmt $u^2(\kappa^2 - \mathbf{n} \cdot \nabla \kappa)$ deutlich schneller ab als die Energiedissipation und erreicht sogar negative Werte, die in Abb. 3.18 nicht dargestellt sind. Am größten ist die Energiedissipation da, wo kleine Radien mit in Richtung des Normalenvektors abnehmendem Radius zusammenkommen.

3.4. Linearisierung um die Gleichgewichtslage

Als stationäre Lösung findet man das laminare Profil mit der zugehörigen Polymerkonformation (3.31). Nur die Amplituden des laminaren Profils und der zugehörigen Polymermode sind von Null verschieden. Die linearisierte Dynamik um diesen Zustand wird im folgenden Abschnitt analysiert.

Als Gleichgewichtskonformation der Polymere im stationären laminaren Profil findet man durch Einsetzen in die Oldroyd-B-Gleichungen

$$\hat{c}_{eq} = \begin{pmatrix} 1 + De^2 \pi^2 \cos^2 \frac{\pi}{2} y & De \frac{\pi}{\sqrt{2}} \cos \frac{\pi}{2} y & 0\\ De \frac{\pi}{\sqrt{2}} \cos \frac{\pi}{2} y & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$
(3.45)

Die Nichtdiagonalelemente sind hier gerade jene, die sich auch aus (3.31) ergeben.

Die Bewegungsgleichungen der Amplituden der Geschwindigkeits- und der Gradientenmoden werden um die Gleichgewichtslage

$$a^{(1)} = 1, \qquad a^{(2)} = \ldots = a^{(9)} = 0$$
 (3.46a)
 $g^{(1)} = \sqrt{2}\kappa_1 De, \qquad g^{(2)} = \ldots = g^{(9)} = 0$

linearisiert. Die Matrix zerfällt in fünf Teile – jeweils mit den zugehörigen Polymermoden² (vgl. Tab. 3.5). Das laminare Profil {1}, die Modifikation des laminaren Profils {9}, Streifen und Stromabwärtswirbel {2, 3}, die Strömungen in Spannweitenrichtung {4, 5} und schließlich der Wirbel in Scherrichtung mit seinem advektierten Bild und der dreidimensionalen Mode {6, 7, 8}.

²Mit { v_1, \ldots, v_k } werden hier die von $\mathbf{u}^{(v_1)}, \, \hat{\mathbf{G}}^{(v_1)}, \ldots, \mathbf{u}^{(v_k)}, \, \hat{\mathbf{G}}^{(v_k)}$ aufgespannten Unterräume bezeichnet.



Tabelle 3.5: Struktur der Jacobimatrix $\partial_i b^{(j)}$ im laminaren Profil. Die Tabelle zeigt jeweils Einträge der Form $\begin{pmatrix} \frac{\partial a^{(j)}}{\partial a^{(i)}} & \frac{\partial a^{(j)}}{\partial g^{(j)}} \\ \frac{\partial g^{(j)}}{\partial a^{(i)}} & \frac{\partial g^{(j)}}{\partial g^{(i)}} \end{pmatrix}$. '**I**' bezeichnet eine voll besetzte Untermatrix, 'L' bezeichnet eine Untermatrix, in der das Element oben rechts verschwindet.

3.4.1. Lineare Stabilitätsanalyse des stationären Zustands

Tollmien [71] zeigte, daß das laminare Profil im newtonschen Fall (s = 0) für alle Re linear stabil ist. Für s > 0 ist das im allgemeinen nicht mehr der Fall. Bei den beiden zweidimensionalen Unterräumen {1} und {9} mit den Jacobimatrizen

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \dot{a}^{(i)}}{\partial a^{(i)}} & \frac{\partial \dot{a}^{(i)}}{\partial g^{(i)}} \\ \frac{\partial \dot{g}^{(i)}}{\partial a^{(i)}} & \frac{\partial \dot{g}^{(i)}}{\partial g^{(i)}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{(1-s)\kappa_{i}^{2}}{Re} & -\frac{s}{DeRe}\frac{\kappa_{i}}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{2}\kappa_{i} & -\frac{1}{De} \end{pmatrix}$$
(3.47)

ergeben sich die Eigenwerte

$$\lambda_{1,2} = -\frac{(1-s)\operatorname{De}\kappa_{i}^{2} + \operatorname{Re}}{2\operatorname{De}\operatorname{Re}} \pm \sqrt{\left(\frac{(1-s)\operatorname{De}\kappa_{i}^{2} + \operatorname{Re}}{2\operatorname{De}\operatorname{Re}}\right)^{2} - \frac{\kappa_{i}^{2}}{\operatorname{De}\operatorname{Re}}} \qquad (3.48)$$

Die Faktoren κ_i sind in Tab. 3.2 angegeben. Dieselben Eigenwerte treten auch im Unterraum $\{2, 3\}$ von Streifen und stromabwärtsgerichtetem Wirbel auf. Für s = 0 vereinfachen sich die Eigenwerte zu $-\kappa_i^2/\text{Re und }-1/\text{De}$.

Der erste Term in (3.48) ist immer negativ. Ein positiver Eigenwert könnte auftreten, wenn der zweite Term unter der Wurzel negativ wird, der Wurzelterm also insgesamt größer als der Term vor der Wurzel. Bei positiven De und Re tritt dieser Fall aber nicht auf. Im Unterraum $\{1, 2, 3, 9\}$ ist das laminare Profil also immer stabil.

Die Diskriminante in (3.48),

$$D = \left(\frac{(1-s)De\kappa_{i}^{2} + Re}{2 De Re}\right)^{2} - \frac{\kappa_{i}^{2}}{De Re} = \left(\frac{(1-s)\kappa_{i}^{2}}{2 Re} + \frac{1}{2 De}\right)^{2} - \frac{\kappa_{i}^{2}}{De Re}, \quad (3.49)$$

ist negativ, falls

$$\frac{\operatorname{Re}}{\kappa_{i}^{2}(1+s+2\sqrt{s})} < \operatorname{De} < \frac{\operatorname{Re}}{\kappa_{i}^{2}(1+s-2\sqrt{s})}.$$
(3.50)

In diesem Bereich sind die Eigenwerte der Matrix komplex. Beim Zerfall dieser Moden sieht man also gedämpfte Oszillationen der Amplituden. Die Kreisfrequenz dieser Oszillation ist der Imaginärteil des Eigenwerts. In einer Periode nimmt die Amplitude um den Faktor $\exp(2\pi \Re \lambda/\Im \lambda)$ ab. Der größte Imaginärteil tritt bei De = Re/($\kappa_i^2(1 + s)$) auf. Dort nimmt die Amplitude in einer Periode um den Faktor $\exp(2\pi/\sqrt{s}) \approx 535$ ab. Die Oszillationen sind also nur bei sehr genauem Hinsehen erkennbar.

Lineare Instabilität des laminaren Profils

Im Unterraum {4,5} wird ein passiver Polymeranteil (s = 0) unabhängig von der Reynoldszahl bei De \geq De₀ instabil. Es gilt

$$De_{0} = \left(\frac{\partial \dot{g}^{(4)}}{\partial g^{(5)}} \bigg|_{eq} \cdot \frac{\partial \dot{g}^{(5)}}{\partial g^{(4)}} \bigg|_{eq} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left(A_{1,5}^{(4)} \cdot A_{1,4}^{(5)} \right)^{-\frac{1}{2}} \approx 2.59.$$
(3.51)

Diese Stabilitätsgrenze ergibt sich aus den Beiträgen der Advektion von $\hat{G}^{(4)}$ durch $\mathbf{u}^{(1)}$ zu $\hat{G}^{(5)}$ (s. (3.26b) und (3.27)) bzw. aus der Advektion von $\hat{G}^{(5)}$ zu $\hat{G}^{(4)}$. Der Antrieb durch die Advektion überwiegt hier die Relaxation der Polymeramplituden.

Bei der etwas höheren

$$De_{1} = \left(\mathcal{A}_{1,7}^{(6)} \cdot \mathcal{A}_{1,6}^{(7)}\right)^{-\frac{1}{2}} \approx 3.56$$
(3.52)

geschieht entsprechendes zwischen den Polymermoden zum Wirbel in Scherrichtung und seinem advektierten Bild im Unterraum $\{6, 7, 8\}$. Bei den Eigenvektoren sind im Fall s = 0 nur die Polymerkomponenten von Null verschieden, d.h. es wachsen nur die Polymeramplituden an, nur der Polymeranteil wird instabil.

Für s > 0 verschieben sich diese Stabilitätsgrenzen. Sie hängen dann auch von der Reynoldszahl ab und überschneiden sich gelegentlich, so daß die Instabilität nicht immer zuerst im Unterraum {4,5} auftritt (Abb. 3.20). Die Eigenwerte lassen sich hier numerisch bestimmen. Abb. 3.19 zeigt die Deborahzahlen, bei denen der größte Realteil der Eigenwerte verschwindet. Oberhalb dieser Deborahzahl ist das laminare Profil linear instabil. Bei hohen Reynoldszahlen ändert sich De_{crit} nur wenig mit s. Die Eigenvektoren zu den kritischen Eigenwerten liegen dabei im Unterraum {4,5} und haben auch von Null verschiedene Geschwindigkeitskomponenten. Hier ist also auch das Geschwindigkeitsfeld von der Instabilität betroffen.

Bei niedrigen Reynoldszahlen hängt De_{crit} stark von s und Re ab. Es gibt dabei einen Bereich von s in dem das laminare Profil für praktisch alle De stabil ist. Um s = 0.4



Abbildung 3.19: Nulldurchgang des größten Eigenwerts der Linearisierung des 9-Moden-Modells mit Polymer um das laminare Profil bei verschiedenen Werten für s. Oberhalb der Kurven ist das laminare Profil instabil. Für Re > 100 steigt De_{crit} monoton mit s an. Für kleine Re steigt De_{crit} zunächst mit s stark an (oberes Bild). Bei s = 0.4 und Re < 2 ist das laminare Profil und der Polymeranteil immer stabil. Bei höheren s fällt De_{crit} für kleine Re wieder ab (unteres Bild). Bei dem stärker gedruckten Teil der Kurve für s = 0.4 tritt die Instabilität zuerst im Unterraum {6, 7, 8} auf, ansonsten zuerst in {4, 5} (vgl. Abb. 3.20). Bei den beiden Ästen der Kurven s = 0.3 bzw. s = 0.35unterhalb von Re = 5 sind die Eigenwerte komplex, wie auch die Teile oberhalb Re ≈ 30 bei $s \ge 0.5$.



Abbildung 3.20: Grenze der linearen Stabilität des laminaren Profils. Die durchgezogene Linie zeigt den Nulldurchgang des größten Eigenwerts der Jacobimatrix des Systems bei s = 0.45. Die Symbole zeigen die Stabilitätsgrenze des vollen Systems bei einer Anfangsstörung des laminaren Profils im Unterraum {4,5} (Kreise) bzw. {6,7,8} (Kreuze). Die Rauten zeigen die Stabilitätsgrenze bei einer voll turbulenten Störung. Oberhalb von Re ≈ 3 tritt eine Instabilität zuerst im Unterraum {4,5} auf, unterhalb zuerst in {6,7,8}.

kann die Instabilität in beiden Unterräumen zuerst auftreten, meist tritt sie aber im Unterraum $\{4, 5\}$ bei niedrigeren De auf.

Das volle System zeigt die gleichen Stabilitätsgrenzen bei Störungen des laminaren Profils wie die Linearisierung (Abb. 3.20). Die Stabilität hängt allerdings von der Richtung der Störung ab.

Der Polymeranteil bewirkt also bei genügend hoher Deborahzahl eine lineare Instabilität des laminaren Profils. Für s = 0 ist nur der passive Polymeranteil davon betroffen, die Geschwindigkeitskomponenten sind weiterhin stabil. Bei s > 0 wachsen mit den Amplituden des Polymeranteils auch Amplituden des Geschwindigkeitsfelds stark an.

An dieser Stelle ist allerdings zu betonen, daß diese Instabilität auf die Wahl der Moden zurückzuführen ist. Die Moden $G^{(4)}$ und $G^{(5)}$ haben jeweils die Form

$$G^{(\nu)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & G_{31}^{(\nu)} \\ 0 & 0 & G_{32}^{(\nu)} \\ G_{13}^{(\nu)} & G_{23}^{(\nu)} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.53)

mit $\nu \in \{4,5\},$ $G_{31}^{(\nu)} = G_{13}^{(\nu)}$ und $G_{32}^{(\nu)} = G_{23}^{(\nu)}.$ Wegen

$$\int (\partial_2 u_1^{(1)} G_{32}^{(4)}) G_{31}^{(5)} d\mathbf{x} \neq 0$$
(3.54)

liefert $a^{(1)}$ zusammen mit $g^{(4)}$ einen Beitrag zu $g^{(5)}$. Umgekehrt facht $a^{(1)}$ mit $g^{(5)}$ die Amplitude $g^{(4)}$ an, was letztlich zu der Instabilität führt. Der Antrieb geht jeweils von den 3-2-Komponenten aus und wirkt auf die 3-1-Komponenten.³ Ohne die starre Kopplung zwischen diesen Komponenten innerhalb der Moden würde diese Instabilität nicht auftreten. Der intermittente Zyklus, der im nächsten Abschnitt beschrieben wird, ist wesentlich auf diese Instabilität zurückzuführen. In direkten numerischen Simulationen wird sie nicht auftreten, und somit wird auch dieser Zyklus nicht zu beobachten sein. Allerdings gibt es Geometrien mit gekrümmten Stromlinien, in denen elastische Instabilitäten des laminaren Profils auftreten [49, 44, 45, 62, 29, 30]. In diesen Geometrien könnte auch ein intermittenter Zyklus wie der nun beschriebene zu beobachten sein.

3.4.2. Dreiphasiger Zyklus

Das instabile laminare Profil kann für De > De₀ kein Attraktor mehr sein. Die turbulenten Zustände können nicht mehr auf das laminare Profil zerfallen. Was ist nun das Langzeitverhalten des Systems? Abb. 3.21 zeigt eine Zeitreihe von $a^{(1)}$ und $|a^{(4)}|$.

³Legt man die untere konvektierte Ableitung des Oldroyd-A-Modells zugrunde, so ergibt sich ebenfalls eine Instabilität. Dabei geht der Antrieb von den 3-1-Komponenten aus und wirkt auf die 3-2-Komponenten: $\int (\partial_2 u_1^{(1)} G_{31}^{(4)}) G_{32}^{(5)} d\mathbf{x} \neq 0$.



Abbildung 3.21: Zeitreihe der Amplitude des Grundprofils und der Strömung in Spannweitenrichtung. Man erkennt drei Phasen: 1. turbulenter Zustand, 2. Zerfall des turbulenten Zustandes, 3. exponentielles Anwachsen von $a^{(4)}$, das schließlich zur Wiederherstellung des turbulenten Zustandes führt. Re = 200, De = 2.65, s = 0.1.

Man erkennt deutlich exponentielle Anstiege von $|a^{(4)}|$, einer der Amplituden im Unterraum {4,5}, in dem die Instabilität des laminaren Profils auftritt. Vor diesem exponentiellen Anstieg erkennt man einen im Mittel ebenfalls exponentiellen Abfall der Amplitude, allerdings mit deutlichen Fluktuationen. Zwischen dem Anstieg und erneutem Abfall liegen unterschiedlich lange turbulente Phasen. Das System bewegt sich also zwischen dem turbulenten Zustand und dem laminaren Profil hin und her. Beide Zustände haben die Eigenschaften eines Sattels: Sie haben ein gewisses Einzugsgebiet, aus dem sich die Trajektorien auf den Sattel zubewegen, und sie haben mindestens eine instabile Richtung, entlang derer sich die Trajektorien entfernen.

Bei der Annäherung an das laminare Profil zeigen die Trajektorien recht starke Fluktuationen. Hier wirken sich zum einen komplexe Eigenwerte der Linearisierung des Flusses um das laminare Profil aus, zum anderen sind auch nichtlineare Anteile des Geschwindigkeitsfeldes von Bedeutung.

Die Phase in der sich die Trajektorie vom laminaren Profil entfernt ist durch das lineare Verhalten dominiert. Die Trajektorie entfernt sich exponentiell, wobei der Exponent durch den größten Eigenwert der Linearisierung bestimmt ist (Abb. 3.22). Auffällig ist die große Reichweite des linearen Verhaltens beim Verlassen des laminaren Profils in Richtung des Unterraumes $\{4, 5\}$ (Abb. 3.22 und 3.23 oben). Die Komponenten in diesem Unterraum wachsen um 3 Größenordnungen exponentiell an, ohne daß ein merklicher Einfluß von Nichtlinearitäten auftritt. Dieses Wachstum bricht erst ab,



Abbildung 3.22: Energie in Unterräumen {4, 5} (oben) bzw. {2, 3} und {6, 7, 8} (unten) zusammen mit dem größten Eigenwert der vollständigen Jacobimatrix und einer Komponente des zugehörigen Eigenvektors aus dem jeweiligen Unterraum. Während des exponentiellen Anstiegs von $E_{\{4,5\}}$ gibt es einen nahezu konstanten positiven Eigenwert $\lambda_{\{4,5\}}$, mit dem $\Delta E_{\{4,5\}} \approx \exp 2\lambda_{\{4,5\}}\Delta t$ gilt. Nur die Komponenten im Unterraum {4, 5} des zugehörigen Eigenvektors sind wesentlich von Null verschieden. Bei $t \gtrsim 5700$ übernimmt ein anderer positiver Eigenwert die führende Rolle, dessen Eigenvektor stärker in {6, 7, 8} orientiert ist. $\lambda_{\{4,5\}}$ bleibt zunächst weiter etwa konstant.



Abbildung 3.23: Das obere Bild zeigt die Energie im Unterraum {4, 5} zusammen mit dem Anteil der Linearisierung an der Gesamtschwindigkeit. Während des exponentiellen Anstiegs von $E_{\{4,5\}}$ ist die Bewegung in diesem Unterraum fast vollständig durch den linearen Anteil $\mathbf{u}_{l}^{(\nu)}$ an der Geschwindigkeit charakterisiert.

Das untere Bild zeigt die entsprechenden Kurven für die Unterräume $\{2, 3\}$ und $\{6, 7, 8\}$. Hier sind nichtlineare Einflüsse deutlich ausgeprägter.

wenn die nichtlinearen Einfüsse aus diesem Unterraum auf die anderen Komponenten diese zu extrem schnellem Wachstum anregen (Abb. 3.23 unten).

Zwischen diesem Entfernen vom laminaren Profil und einer erneuten Annäherung liegen unterschiedlich lange turbulente Phasen. Das System befindet sich also in einem dreiphasigen Intermittenzzyklus aus turbulenten Phasen, dem Zerfall der turbulenten Zustände mit anschließendem exponentiellen Anwachsen von $\alpha^{(4)}$, das schließlich wieder in den turbulenten Zustand zurückführt.

Das Verhalten im turbulenten Zustand selbst ist wesentlich komplexer als das Verhalten in der Umgebung des laminaren Profils. Dieser Zustand hat Eigenschaften eines Sattels – viele stabile Richtungen, d.h. Trajektorien aus einem großen Einzugsbereich bewegen sich auf diesen Zustand zu, aber auch instabile Richtungen, denn die Trajektorien bleiben nicht für alle Zeiten in diesem Zustand. Ebenso zeigt der Zustand typische Eigenschaften chaotischer Bewegung – starke Abhängigkeit des Verhaltens von den Anfangsbedingungen, positive Lyapunovexponenten. Für ein solches Gebilde wird häufig der Begriff des chaotischen Sattels verwendet. Die typischen Eigenschaften eines chaotischen Sattels sind positive Lyapunovexponenten und exponentialverteilte Lebensdauern dieser Zustände [27].

Die Lebensdauerverteilungen dieser Zustände werden im nächsten Abschnitt genauer untersucht, insbesondere im Hinblick auf die Auswirkungen des Polymeranteils. Dazu sind zunächst eher die unterkritischen Deborahzahlen interessant. Führt der Polymeranteil zu einer Laminarisierung der Strömung oder macht er sie eher turbulenter?

3.5. Lebensdauer von finiten turbulenten Störungen

Die lineare Stabilitätsanalyse des letzten Abschnittes gibt Auskunft über das Verhalten des Systems in der Nähe des laminaren Grundprofils, d.h. über die Entwicklung infinitesimaler bzw. sehr kleiner Störungen. In diesem Abschnitt geht es nun um das Verhalten von Störungen endlicher Größe, genauer gesagt, von Störungen, die so groß sind, daß die Nichtlinearitäten nicht mehr vernachlässigbar sind.

Die Frage hierbei ist, ob die sich aus solchen Störungen entwickelnden turbulenten Zustände stabil sind, oder ob sie auf den laminaren Zustand zerfallen. Im letzteren Fall hieße das, daß der laminare Zustand ein globaler Attraktor ist.

Als Indikator für die Stabilität des turbulenten Zustands benutzen wir die Lebensdauern von endlichen Anfangsstörungen. Wir nehmen als Lebensdauer eines Zustandes die Zeit an, bis die Energie des Zustands

$$\mathsf{E} = \sum_{\nu=1}^{9} \left[(a^{(\nu)} - a^{(\nu)}_{eq})^2 + s(g^{(\nu)} - g^{(\nu)}_{eq})^2 \right]$$
(3.55)

unter eine gewisse Schwelle (etwa 10⁻⁶) fällt. Es zeigt sich, daß die Energie nach Unterschreiten dieser Schwelle nicht mehr nennenswert anwächst, wenn die Deborahzahl unterhalb der kritischen Deborahzahl zur linearen Instabilität liegt.

Im newtonschen Fall haben Moehlis et. al [47] exponentielle Lebensdauerverteilungen gefunden, allerdings treten bei höheren Reynoldszahlen und kleinerem Strömungsgebiet deutliche Abweichungen vom exponentiellen Verhalten auf. Diese Abweichungen werden auf einen stabilen Attraktor im turbulenten Zustand zurückgeführt.

In der Wahrscheinlichkeitstheorie wird die Exponentialverteilung als die einzige Verteilung beschrieben, die "gedächtnislos" ist: Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Zustand ab einem gewissen Zeitpunkt t_1 noch eine Spanne lebt, ist unabhängig davon, wie lange der Zustand schon existiert, $P(T > t_1 + t|T > t_1) = P(T > t)$. Mit der Definition der bedingten Wahrscheinlichkeit (es gelte $t_1 \ge 0, t \ge 0$)

$$P(T > t_1 + t|T > t_1) = \frac{P(\{T > t_1 + t\} \cap \{T > t_1\})}{P(T > t_1)} = \frac{P(T > t_1 + t)}{P(T > t_1)} = P(T > t)$$
(3.56)

folgt, daß P(T > t) exponentialverteilt ist

$$P(T > t) = exp(-\lambda t)$$
(3.57)

mit dem Erwartungswert $E(T) = 1/\lambda$. Übertragen auf den vorliegenden Fall heißt das, daß der turbulente Zustand nicht altert. Egal wie lange der Zustand lebt, kann er immer mit der gleichen Wahrscheinlichkeit im nächsten Moment zerfallen.

Exponentielle Lebensdauern werden als typische Eigenschaft der Dynamik in der Umgebung eines chaotischen Sattels beschrieben [27, 37]. Der turbulente Zustand wird hier als chaotischer Sattel verstanden. Ein großer Teil der möglichen Anfangsbedingungen führt in diesen Zustand, aber der turbulente Zustand hat auch einen Ausgang zum laminaren Zustand. Die Vorstellung ist, daß es im turbulenten Zustand viele instabile periodische Bahnen gibt, zwischen denen sich der Zustandsvektor bewegt. Wenige der periodischen Bahnen haben auch eine instabile Mannigfaltigkeit, die aus dem turbulenten Zustand herausführt. Bei niedrigen Reynoldszahlen gibt es noch wenige periodische Zustände, und es wird nicht lange dauern, bis der Ausgang zum laminaren Zustand gefunden ist. Bei steigender Reynoldszahl nimmt die Zahl der instabilen Bahnen stark zu, während die möglichen Ausgänge nicht wesentlich größer werden. So nimmt auch die Verweildauer im turbulenten Zustand stark zu.

3.5.1. Lebensdauern von eindimensionalen Störungen

Störungen des laminaren Profils in nur einer der Amplituden breiten sich zum Teil auf die anderen Amplituden aus. Tab. 3.6 zeigt die unter diesen Voraussetzungen vorhandenen Kopplungen.

j∖i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	+		+					+	
2		+	+						
3			+						
4				+	+				
5				+	+				
6						+	+	+	
7						+	+	+	
8								+	
9			+					+	+

Tabelle 3.6: Ausbreitung von Störungen des laminaren Flusses. Eine Störung in $a^{(i)}$ oder $g^{(i)}$ breitet sich in die mit + markierten Komponenten $a^{(j)}$ und $g^{(j)}$ aus.

Die Lebensdauern von Störungen der Größe z in den Amplituden $a^{(1)}$, $a^{(2)}$ oder $a^{(9)}$ sind von der Form a log bz. Hier sehen wir einen einfachen exponentiellen Zerfall der Störungen ohne Wechselwirkung mit anderen Moden.

Störungen in $a^{(4)}$, $a^{(5)}$, $a^{(6)}$ oder $a^{(7)}$ zeigen bei s = 0 das gleiche Verhalten. Für s > 0 aber treten in der Abhängigkeit der Lebensdauer von der Größe der Störung Stufen auf. Diese rühren von Oszillationen in der Energie her, da das Unterschreiten der Schwelle in diesem Fall auch von der Phase der Oszillation abhängt.

Störungen in $a^{(3)}$ und in $a^{(8)}$ wechselwirken stark mit anderen Amplituden. Das spiegelt sich auch in den Lebensdauern dieser Störungen wider. Die Störungen in $a^{(3)}$ zeigen für kleine Amplituden logarithmische Abhängigkeit der Lebensdauern von der Amplitude. Bei Störungsamplituden von einigen 10^{-2} zeigt sich eine deutliche Erhöhung gegenüber diesem logarithmischen Anstieg. Oberhalb von etwa 0.2 zeigt sich wieder ein logarithmischer Anstieg, der etwas flacher ist als der bei kleinen Störungsamplituden. Bei genauerem Ansehen der Zeitverläufe zeigt sich, daß die Gesamtenergie im Moment des Unterschreitens der Zerfallsgrenze bei kleinen Störungen von $a^{(2)}$ dominiert wird, bei großen Störungen aber von $a^{(1)}$. Die Beule in der Kurve markiert den Übergangsbereich, die unterschiedlichen Steigungen kommen von den unterschiedlichen Zerfallsraten von $a^{(1)}$ und $a^{(2)}$. Bei höheren s wird der Zerfallszeitpunkt von den Polymeramplituden $g^{(1)}$ und $g^{(2)}$ bestimmt, das qualitative Verhalten bleibt jedoch das gleiche.

Die Störungen in $a^{(8)}$ zeigen für kleine Störungen stufiges Verhalten, ähnlich dem von $a^{(4)}$ bis $a^{(7)}$. In der Tat sind hier die Zerfallszeitpunkte durch den Verlauf von $a^{(7)}$ und auch bei kleinen s schon von $g^{(7)}$ bestimmt. Dann folgt ein steiler Anstieg, der schließlich auf ein flaches Plateau mündet (Abb. 3.24). In diesem Bereich bestimmt $a^{(1)}$ den Zerfallszeitpunkt. Der Anstieg und das Plateau rühren von der Wechselwirkung mit $a^{(6)}$ her.



Abbildung 3.24: Lebensdauer von eindimensionalen Störungen des laminaren Profils abhängig von der Größe der Störung. Dargestellt sind nur die Störungen in $a^{(3)}$ und $a^{(8)}$. Störungen in den anderen Amplituden zerfallen exponentiell, ggf. mit Oszillationen in der Energie, und zeigen dabei regelmäßige Abhängigkeiten von der Größe der Störung. Die Stufen rühren von Oszillationen in der Amplitude her, bei denen der Zerfallszeitpunkt auch von der Phase der abhängt. Re = 100, s = 0.1.

j∖i	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1									
2				*	*	*	*	*	
3				*	*	*	*	*	
4		*	*			*	*	*	
5		*	*			*	*	*	
6		*	*	*	*				
7		*	*	*	*				
8		*	*	*	*				
9									

Tabelle 3.7: Eine Störung mit Komponenten in a⁽ⁱ⁾ und a^(j) breitet sich für die mit
* markierten Kombinationen in <u>alle</u> Komponenten aus. Die Kopplungen sind unabhängig von der Reynoldszahl. Die Tabelle gibt an, welche Moden man gleichzeitig anregen kann, um zu einem voll turbulenten Zustand zu gelangen.



 Abbildung 3.25: Lebensdauer von zweidimensionalen Störungen des laminaren Profils. Kleine Störungen zerfallen ziemlich schnell (violetter Bereich). Größere Störamplituden führen in turbulente Zustände, und die Lebensdauern steigen drastisch an. Die Lebensdauern der turbulenten Zustände sind stark abhängig von der Größe und Orientierung der Störung.



Abbildung 3.26: Verteilungen der Lebensdauern von finiten turbulenten Störungen des laminaren Profils bei Re = 400, De = 1.0. Die Lebensdauern sind exponentialverteilt. Für kleine Deborahzahl hängen die Zerfallsraten nur wenig von s ab. Für größere De steigt die mittlere Lebensdauer an und die s-Abhängigkeit wird stärker, allerdings nicht monoton.

3.5.2. Lebensdauer von turbulenten Zuständen

Bringt man eine endliche Störung in mindestens zwei der Unterräume $\{2, 3\}, \{4, 5\}$ und $\{6, 7, 8\}$, so breitet sich die Störung auf alle Amplituden des Modells aus (Tab. 3.7). Überschreitet die Amplitude der Störung eine gewisse Schwelle (abhängig von den angeregten Moden), erreicht das System den turbulenten Zustand, einen Zustand, der nicht mehr annähernd monoton zerfällt, sondern über längere Zeit erhalten bleibt. Die Anregungsschwellen reichen von kleiner als 0.01 bei a⁽³⁾ bis zur Größenordnung von einigen 0.1 (Abb. 3.25). Die Lebensdauern der so erzeugten Zustände zeigen keine glatte Abhängigkeit von den Anfangsamplituden, sondern kleine Änderungen in der Anfangsstörung wirken sich stark auf die Lebensdauer aus. Die Lebensdauern von Ensembles von Anfangsbedingungen sind dabei zum größten Teil exponentialverteilt (Abb. 3.26).

Die mittleren Zerfallsraten von turbulenten Zuständen wurden abhängig von den Parametern Re, De und s bestimmt (Abb. 3.27, 3.28, 3.29). Die Zerfallsraten fallen mit steigender Reynoldszahl etwa um einen Faktor 4 pro 100 ab (also $\propto e^{-\text{Re}/72.13}$). Man erkennt bei kleiner Deborahzahl jeweils eine typische Zerfallsrate, die etwa der Zerfallsrate im newtonschen Fall entspricht. Bei steigender Deborahzahl fallen die Zerfallsraten plötzlich stark ab. Dieser Abfall geschieht aber abhängig von s bei unterschiedlichen Deborahzahlen. Hier zeigt sich ein Übergang von einem Bereich newtonschen Verhaltens zu einem Bereich, in dem das Verhalten von den Polymeren dominiert ist. Die Grenzen zwischen diesen Bereichen sind in Abb. 3.30 in der De-s-Ebene dargestellt. Unterhalb der Grenzen finden wir Zerfallsraten wie im newtonschen Fluid, oberhalb sind die Zerfallsraten vom Polymeranteil beeinflußt. Die Polymere bewirken also bei kleiner Deborahzahl kaum eine Veränderung bzw. (bei Re = 200) eine leichte Verlängerung der Lebensdauern der turbulenten Zustände. Bei steigender Deborahzahl bewirken die Polymere, daß die turbulenten Zustände länger existieren.

Durch die Renormierung der Reynoldszahl wird die Reynoldszahl mit s erhöht. Den Unterschied zwischen newtonschem und viskoelastischem Spannungstensor machen die Differenzen s $(\tilde{g}^{(\nu)} - \tilde{a}^{(\nu)})$ in (3.35) aus. Bei kleiner Deborahzahl sind diese Differenzen gering. Mit steigender Deborahzahl folgt \tilde{g} mit größerer Trägheit der Amplitude \tilde{a} . Die Differenzen werden größer und bekommen stärkeren Einfluß (s. Abb. 3.5–3.7). Dann führt die praktisch erhöhte Reynoldszahl zu niedrigeren Zerfallsraten.

Was passiert nun bei der kritischen Deborahzahl zur linearen Instabilität? Oberhalb dieser kritischen Deborahzahl fallen alle Zerfallsraten auf null ab, da kein Zustand mehr endgültig zerfällt. Die Grenze im Phasendiagramm müßte also für alle s unterhalb dieser kritischen Deborahzahl liegen, s_{crit} (De) also spätestens bei der kritischen Deborahzahl auf null abfallen.

Abb. 3.21 zeigt den Zeitverlauf zweier Amplituden für eine überkritische Deborahzahl. Die Gesamtenergie macht nicht den Eindruck, als würde sie irgendwann endgültig gegen null streben. Man erkennt aber deutlich, daß unterschiedlich lange turbulente Phasen ($a^{(1)}$ liegt dabei unterhalb von 0.5) von Phasen unterbrochen sind, in



Abbildung 3.27: Zerfallsraten β der exponentiellen Lebensdauerverteilungen für Re = 200. P(T > t) $\propto exp - \beta t.$



Abbildung 3.28: Zerfallsraten β der exponentiellen Lebensdauerverteilungen für Re = 300. P(T > t) $\propto \exp{-\beta t}$. Die Werte für De > 2.5 im unteren Bild sind mit einer höheren Energieschwelle (10⁻³) für den Zerfall des turbulenten Zustands bestimmt worden.


Abbildung 3.29: Zerfallsraten β der exponentiellen Lebensdauerverteilungen für Re = 400. P(T > t) $\propto exp - \beta t.$



Abbildung 3.30: Grenzen zwischen newtonschem und viskoelastischem Verhalten in den Lebensdauerverteilungen. Die Punkte sind die Schnittpunkte der Steigungskurven aus Abb. 3.27 – 3.29 mit einer mittleren Steigung.

denen der turbulente Zustand zunächst zerfällt, dann aber nach einem exponentiellen Anstieg von $a^{(4)}$ ein neuer turbulenter Zustand erzeugt wird. Im Verlauf dieses Zyklus fällt die Gesamtenergie zwar nicht unter die angesetzte Schwelle für den Zerfall, aber es ist nicht der turbulente Zustand, der beliebig lange lebt, sondern der Zyklus. Die turbulenten Phasen haben nur endliche Lebensdauern wie bei kleineren Deborahzahlen.

In der Tat zeigen die Lebensdauern bezüglich einer höheren Schwelle $(10^{-3} - bei unterkritischen Deborahzahlen zerfallen die Störungen, die diese Schwelle erreichen, bei überkritischen setzt der exponentielle Anstieg der Amplituden in {4,5} erst deutlich nach Unterschreiten dieser Schwelle ein) eine stetige Fortsetzung des Verhaltens ein wenig über die kritische Deborahzahl hinaus (Werte für De <math>\geq 2.5$ in Abb. 3.28). Die mittleren Lebensdauern stimmen bei unterkritischen Deborahzahlen für beide Schwellen überein.

Auch bei überkritischer Deborahzahl (De = 2.65) beginnen die mittleren Lebensdauern für kleine s im newtonschen Bereich, und der Übergang vom newtonschen zum polymerdominierten Verhalten bleibt bei der höheren Schwelle ebenfalls zwischen 0.11 < s < 0.14.

Die Änderung der Lebensdauer der turbulenten Zustände mit steigender Deborahzahl stehen also nicht in direktem Zusammenhang mit der linearen Instabilität des laminaren Profils.



Abbildung 3.31: Zerfallsraten β der exponentiellen Lebensdauerverteilungen für Re = 400. Mit F $\propto (1 + s)/Re$. P(T > t) $\propto exp - \beta t$. Die Zerfallsraten nehmen für kleine De mit steigendem s zu. Sie sind dabei unabhängig von De. Ab einer gewissen von s abhängigen Deborahzahl fällt die Zerfallsrate ab.



Abbildung 3.32: Verteilung der Kurzzeit-Lyapunovexponenten bei Re = 400. Aus den Daten ergibt sich der Verteilungsparameter $\Delta \approx 0.064$.

Lebensdauern bei Renormierung der Kraft

Am Ende von Abschnitt 3.2.1 wurde neben der Renormierung der Reynoldszahl auch eine Renormierung der antreibenden Kraft vorgeschlagen (3.36),

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \frac{\sqrt{2}\beta^2}{\mathrm{Re}} (1+s)\sin(\beta \mathbf{y})\mathbf{e}_{\mathbf{x}}.$$
 (3.58)

Die mit dieser renormierten Kraft bestimmten Zerfallsraten sind in Abb. 3.31 dargestellt. Für De ≤ 1.2 und s ≤ 0.6 steigt die Zerfallsrate etwa exponentiell mit s an. Für kleine De setzt sich das noch bis zu höheren s fort. In diesem Bereich ist die Zerfallsrate nahezu unabhängig von De, oberhalb von De > 1.3 beginnt die Zerfallsrate angefangen von den größeren s her abzufallen. Anders als bei Renormierung der Reynoldszahl nehmen die mittleren Lebensdauern der turbulenten Zustände bei kleinen Deborahzahlen mit der Konzentration exponentiell ab. Mit steigender Deborahzahl bewirken die Polymere bei konstanter Konzentration aber auch hier eine Verlängerung der Lebensdauern. Mit steigendem s nimmt die mittlere Lebensdauer aber in den meisten Fällen weiterhin zu.



Abbildung 3.33: Verteilung der Polymerlänge im Modell zur Scherströmung ohne Polymermoden. Es wurden 1000 Polymermoleküle passiv in der Strömung advektiert. Die Länge wurde von oben und von unten beschränkt. Die Längenverteilungen folgen weitgehend einem Potenzgesetz. Im markierten Bereich wurde die eingezeichnete Gerade angepaßt. Die so ermittelten Exponenten der Verteilungen sind in Abb. 3.34 dargestellt. Re = 400, De = 30.



Abbildung 3.34: Exponenten der Polymerlängenverteilungen im Modell zur Scherströmung *ohne* Beteiligung der Polymermoden. Die Exponenten wurden wie in Abb. 3.33 bei verschiedenen Relaxationszeiten der Moleküle und zu mehreren Zeitpunkten bestimmt. Aus der Steigung der eingezeichneten Ausgleichsgeraden ergibt sich der Verteilungsparameter $\Delta \approx 0.053$. Re = 400, De = 1, s = 0.

3.6. Polymerlängenverteilungen und Lyapunovexponenten

Die Abbildungen 3.32 und 3.34 zeigen Häufigkeitsverteilungen der Kurzzeitlyapunovexponenten bzw. die Steigungen der Polymerlängenverteilungen im Modell der Scherströmung. Dazu wurde die Entwicklung der Polymerlänge bzw. eines Linienelements entlang Ensembles von Trajektorien im turbulenten Geschwindigkeitsfeld berechnet. Die Kurzzeitlyapunovexponenten zeigen wie im Fall der ABC-Strömung annähernd Normalverteilungen, ggf. überlagert von einem zusätzlichen Anteil bei Null. Die Breite der Verteilungen nimmt etwa wie Δ/T mit der Länge des Mittelungsintervalls T ab. Für die größten Lyapunovexponenten findet man bei Re = 400, $1 \le De \le 2.5$ und $0 \le s \le 0.5$ Werte zwischen 0.043 und 0.048. Für die Breite der Verteilung findet man $\Delta \approx 0.064$. Die Verteilungen der Polymerlängen folgen in weiten Teilen einem Potenzgesetz (s. Abb 3.33). Der Exponent nimmt proportional zur inversen Relaxationszeit λ der Moleküle ab und erreicht den kritischen Wert -1 bei $1/(2\lambda) \approx \mu$. Dieser kritische Wert markiert den coil-stretch-Übergang. Er liegt deutlich über der kritischen Deborahzahl, die in (3.51) als lineare Stabilitätsgrenze des laminaren Grundprofils gefunden wurde. Dies ist neben der Entwicklung der Zerfallsraten der turbulenten Zustände in der Nähe dieser kritischen Deborahzahl ein weiterer Hinweis darauf, daß die Instabilität des laminaren Grundprofils die Stabilitätseigenschaften des turbulenten Zustands nicht unmittelbar beeinflußt.

Die Polymere wirken sich stark auf das laminare Grundprofil aus, sie können eine lineare Instabilität des Grundprofils bewirken. Im turbulenten Zustand können sie die mittleren Lebensdauern deutlich verlängern, auf die lokalen Streckraten nehmen sie aber kaum Einfluß.

4. Zusammenfassung und Ausblick

Balkovsky et al. [2] stellen einen Zusammenhang zwischen der Verteilung von Kurzzeit-Lyapunovexponenten einer Strömung und der Längenverteilung von in der Strömung passiv mitbewegten Polymermolekülen her.

- Die Verteilung der Kurzzeit-Lyapunovexponenten nähert sich bei genügend großen Mittelungsintervallen einer Normalverteilung an. Die Varianz ist umgekehrt proportional zum Mittelungsintervall.
- Die Verteilung der Polymerlänge R folgt einem Pareto-Gesetz: $P(R) \propto R^{-(1+\alpha)}$.
- Der Exponent α ist proportional zur Differenz zwischen Lyapunovexponent und der Relaxationszeit (die dimensionslose Relaxationszeit wird als *Deborahzahl* bezeichnet).
- Die Proportionalitätskonstante läßt sich aus der Varianz der Lyapunovexponenten bestimmen.

Aus diesem Zusammenhang ergibt sich auch ein Ausdruck für die kritische Deborahzahl zum sogenannten *coil-stretch-Übergang* in der Längenverteilung der Polymere.

Die Anwendbarkeit dieser Beziehungen wurde in zwei Strömungsformen untersucht, zum einen in einem einfachen stationären Fluß mit chaotischen Trajektorien, einer modifizierten ABC-Strömung (Kapitel 2), zum anderen in einem niedrigdimensionalen Modell für eine Scherströmung [47] (Kapitel 3). Die Polymere wurden in beiden Fällen wie auch bei Balkovsky durch elastische Hanteln dargestellt. Die Entwicklung der Länge wurde entlang Ensembles von Trajektorien berechnet.

In beiden Fällen wurde eine gute Übereinstimmung mit den Vorhersagen von Balkovsky gefunden (Abschnitt 2.2). Das Verhalten des Exponenten α in Abhängigkeit von der Relaxationszeit konnte bestätigt werden. Allerdings zeigt sich in der ABC-Strömung eine Abweichung zwischen der Proportionalitätskonstanten und der Varianz der Lyapunovexponenten.

Die Vorhersagen von Balkovsky beziehen sich auf den Bereich, in dem die Relaxation der Polymere durch das Hookesche Gesetz beschrieben ist. Darüber hinausgehend wurde hier auch die Verteilung der Polymerlängen mit einer oberen Schranke untersucht. Es zeigt sich, daß der lineare Zusammenhang zwischen Relaxationszeit und dem Exponenten α auch über den coil-stretch-Übergang hinaus gültig bleibt.

4. Zusammenfassung und Ausblick

Ein anderes Bild zeigt sich bei der Berechnung der Länge an festen Gitterpunkten der stationären ABC-Strömung (Abschnitt 2.3). Hier liegt die kritische Deborahzahl deutlich niedriger als sie sich aus dem Lyapunovexponenten ergeben würde. Die extrem großen Polymerlängen treten dabei lokalisiert auf, zum einen in der Umgebung von Fixpunkten, zum anderen in der Umgebung von periodischen und von heteroklinen Orbits. Die größten Eigenwerte der Linearisierungen um die Fixpunkte und die periodischen Orbits bestimmen in diesem Fall die kritische Deborahzahl. Die heteroklinen Orbits führen bei endlicher Deborahzahl nicht zu einer wirklichen Instabilität, bei entsprechend hohen Deborahzahlen können aber beliebige maximale Längen erreicht werden. Die starke Streckung in der Umgebung der Fixpunkte und heteroklinen Orbits bleibt auch dann erhalten, wenn die Objekte wegen veränderter Parameter nicht mehr existieren.

Die Verteilungen von Krümmung und Torsion der Trajektorien in der ABC-Strömung wurde in Abschnitt 2.4 untersucht.

Die nichtnormale Verstärkung spielt eine wichtige Rolle beim Turbulenzübergang. Dabei kann die Energie eines Zustands, obwohl er aus zwei zerfallenden Moden zusammengesetzt ist, im Zeitverlauf zunächst anwachsen. In ebenen Scherströmungen ist die Wechselwirkung zwischen Wirbeln und Streifen in Strömungsrichtung ein Beispiel, bei dem diese nichtnormale Verstärkung auftritt. Moehlis et al. [47] haben ein neundimensionales Modell einer ebenen Scherströmung angegeben, das insbesondere diese Wirbel-Streifenwechselwirkung beinhaltet (Kapitel 3). Die maximale während des Zerfalls auftretende Amplitude hängt von den Längenverhältnissen des Strömungsgebietes ab. Die größte Verstärkung tritt bei der *optimalen Wellenzahl*, γ_{opt} , auf.

Beschänkt man die Dynamik auf den Unterraum der Wirbel und Streifen, so ist die optimale Wellenzahl unabhängig von der Anfangsamplitude der Wirbel und unabhängig von der Reynoldszahl. Die maximal erreichte Amplitude der Streifen ist proportional zur Anfangsamplitude der Wirbel und zur Reynoldszahl. Im vollen System ist die maximal erreichte Amplitude nicht mehr proportional zur Anfangsamplitude der Wirbel. Wirbel und Streifen schwächen zusammen das laminare Profil und damit den Vermittler der Wechselwirkung. Mit wachsender Anfangsamplitude der Wirbel nimmt die optimale Wellenzahl ab (Abschnitt 3.1).

Dieses Modell der Scherströmung wurde durch einen Satz von weiteren neun Moden zu einem Modell für eine viskoelastische Scherströmung erweitert (Abschnitt 3.2). Dazu wurde der Polymerspannungstensor in Moden entwickelt, die mit zugrundegelegtem Oldroyd-B-Modell aus den Geschwindigkeitsmoden des Modells von Moehlis hervorgehen.

Die Auswirkung dieses Polymeranteils auf die Wirbel-Streifen-Wechselwirkung wurde untersucht (Abschnitt 3.2.2). Es zeigt sich, daß sich die Wellenzahl der optimalen Verstärkung durch den Polymeranteil zu größeren Wellenzahlen hin verschiebt. Die Verschiebung nimmt mit steigender Deborahzahl ab, mit steigender Konzentration nimmt sie zu. Die effektivste Verstärkung liegt also im viskoelastischen Fall bei schmaleren Strukturen vor.

Am Beispiel des Wirbels in Strömungsrichtung wurde in Abschnitt 3.3 eine Beziehung zwischen der lokalen Energiedissipation und dem Verhalten der Krümmung von Trajektorien und der lokalen Winkelgeschwindigkeit hergestellt, die in einem Bereich konstanter Winkelgeschwindigkeit eine gute Übereinstimmung zeigt. Eine Verallgemeinerung des Ausdrucks, ggf. unter Einbeziehung der Torsion, steht noch aus.

Eine lineare Stabilitätsanalyse um das laminare Grundprofil zeigt, daß eine passive Polymerkomponente oberhalb einer von der Reynoldszahl unabhängigen Deborahzahl instabil wird und die Amplituden des Polymerspannungstensors vom Grundzustand abgestoßen werden (Abschnitt 3.4). Wirkt der Polymeranteil auf die Strömung zurück, verschiebt sich diese Stabilitätsgrenze abhängig von der Reynoldszahl, und die Instabilität weitet sich auf das Geschwindigkeitsfeld aus. Im Zusammenhang mit dieser Instabilität tritt bei geeigneten Deborahzahlen ein intermittenter Zyklus auf, in dessen Verlauf turbulente Zustände zunächst zerfallen, dann aber aufgrund der Instabilität des laminaren Grundprofils wieder angefacht werden (Abschnitt 3.4.2).

Diese Instabilität ist auf spezielle Kopplungen innerhalb der beteiligten Polymermoden zurückzuführen und wird in einer vollen numerischer Simulation in dieser Form nicht auftreten, ebenso der auf diese Instabilität zurückzuführende intermittente Zyklus. In anderen Systemen, die tatsächlich eine elastische Instabilität des laminaren Profils zeigen, könnte ein derartiger Zyklus aber durchaus auftreten. Dies könnte zum Beispiel am Taylor-Couette-System oder an einer ebenen Couette-Strömung mit zusätzlicher Corioliskraft untersucht werden.

Die Verteilungen der Lebensdauern der turbulenten Zustände sind Exponentialverteilungen. Das ist ein Indiz dafür, daß es sich bei dem turbulenten Zustand um einen *chaotischen Sattel* handelt. Der Zustand hat ein großes Einzugsgebiet und wirkt zunächst wie ein chaotischer Attraktor. Allerdings hat er auch einen "kleinen" Ausgang, über den die Trajektorien auf das laminare Profil zurückfallen können. Dieser Ausgang äußert sich in einer Zerfallswahrscheinlichkeit, die sich dann in der exponentiellen Verteilung der Lebensdauern zeigt.

Die Auswirkung des Polymeranteils auf die Lebensdauern der turbulenten Zustände wurde für Reynoldszahlen bis 400 und Deborahzahlen bis über die lineare Stabilitätsgrenze hinaus untersucht (Abschnitt 3.5). Es zeigt sich für feste Reynoldszahlen eine typische Lebensdauer für das newtonsche Fluid und eine für das von den Polymeren dominierte Fluid. Die mittlere Lebensdauer mit Polymeren ist länger als ohne Polymere. Den Übergang zwischen diesen Lebensdauern findet man bei einer bestimmten von der Konzentration der Polymere abhängigen Deborahzahl. Mit Hilfe dieses Übergangs kann man in der Deborahzahl-Konzentrations-Ebene eine Grenze zwischen newtonschem und polymerdominiertem Fluid bestimmen (Abb. 3.30).

Für Deborahzahlen oberhalb der kritischen Deborahzahl zur linearen Instabilität könnte man erwarten, daß die Lebensdauern der turbulenten Zustände bei beliebig kleinen Konzentrationen denen des polymerdominierten Fluids entsprechen. Das ist aber nicht der Fall. Die Instabilität des laminaren Profils führt nicht zu einer plötz-

4. Zusammenfassung und Ausblick

lichen Änderung der Lebensdauern im turbulenten Zustand. In diesem Sinne ist der turbulente Zustand unabhängig vom laminaren Zustand.

Für den turbulenten Zustand wurden auch die Verteilungen der Lyapunovexponenten und der Längen von advektierten Polymeren untersucht (Abschnitt 3.6). Wie bei der ABC-Strömung sind die Lyapunovexponenten in etwa normalverteilt, und die Verteilungen der Polymerlängen zeigen in einem mittleren Längenbereich algebraische Verteilungen. Der Exponent der Polymerlängenverteilung überschreitet den Wert -1im Mittel auch hier, wenn die Relaxationszeit der Polymere dem inversen Lyapunovexponenten entspricht. Allerdings sind hier die Unsicherheiten erheblich größer.

Die kritische Relaxationszeit liegt deutlich über der Deborahzahl zur linearen Instabilität des laminaren Profils. Auch hier ist also das Verhalten im turbulenten Zustand unabhängig von der Stabilität des laminaren Zustandes.

Die Polymere zeigen in diesem System einen fundamentalen Einfluß auf das laminare Profil, indem sie eine Instabilität bewirken können. Der Einfluß auf die Dynamik im turbulenten Zustand ist eher begrenzt, die lokalen Streckraten werden durch den zusätzlichen Polymeranteil nur wenig verstärkt. Die mittleren Lebensdauern der turbulenten Zustände nehmen dabei aber deutlich zu.

A.1. Koordinaten

Seien x₁, x₂, x₃ kartesische Koordinaten. Ein neues Koordinatensystem am Ort $\mathbf{r} = x_i \mathbf{e}_i$ sei durch

$$q^{i}(x_{1}, x_{2}, x_{3})$$
 (A.1)

gegeben. Die kartesischen Koordinaten lassen sich aus den neuen Koordinaten berechnen

$$x_i(q^1, q^2, q^3),$$
 (A.2)

die Transformation ist also invertierbar. Die Basis des kartesischen Koordinatensystems sind die drei Einheitsvektoren \mathbf{e}_i . Der Ortsvektor \mathbf{r} ist im kartesischen System

$$\mathbf{r} = x_{i}(q^{1}, q^{2}, q^{3})\mathbf{e}_{i}.$$
 (A.3)

Die (ortsabhängigen) Basisvektoren des neuen Systems sind

$$\mathbf{g}_{i} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial q^{i}} = \mathbf{e}_{j} \frac{\partial x_{j}}{\partial q^{i}}.$$
 (A.4)

Die reziproken Basisvektoren sind gegeben durch

$$\mathbf{g}^{1} = \frac{\mathbf{g}_{2} \times \mathbf{g}_{3}}{\mathbf{g}_{1} \cdot (\mathbf{g}_{2} \times \mathbf{g}_{3})} \tag{A.5}$$

und die zyklischen Permutationen. Man kann sie auch durch

$$\mathbf{g}^{i} = \nabla q^{i} = \mathbf{e}_{j} \frac{\partial q^{i}}{\partial x_{j}}$$
(A.6)

Es gelten die Orthonormalitätsbeziehungen

$$\mathbf{g}^{i} \cdot \mathbf{g}_{j} = \delta^{i}_{j}$$
 und $\mathbf{g}_{i} \cdot \mathbf{g}^{j} = \delta^{j}_{i}$. (A.7)

Die anderen Produkte der Basisvektoren sind die metrischen Koeffizienten

$$g_{ij} = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j$$
 und $g^{ij} = \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^j$ (A.8)

für die gilt

$$g_{ik}g^{kj} = \delta^j_i. \tag{A.9}$$

111

Vektoren und Tensoren können sowohl in den Basisvektoren als auch in den reziproken Basisvektoren entwickelt werden. Man spricht dann von kontravarianten (Basis) und kovarianten (reziproke Basis) Komponenten:

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}_{i} \mathbf{x}^{i}$$
 mit kovarianten Komponenten (A.10a)

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}^{i} \mathbf{x}_{i}$$
 mit kontravarianten Komponenten . (A.10b)

Kovariante und kontravariante Komponenten stehen in der Beziehung

$$\mathbf{x}_{i} = \mathbf{g}_{ij} \mathbf{x}^{j} \tag{A.11}$$

zueinander.

Die Zeilen der Matrix

$$\Delta_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial q^j} \tag{A.12}$$

enthalten also die Basisvektoren. bekommen. Sie sind die Spalten in

$$\mathsf{E}^{\mathbf{i}\mathbf{j}} = \frac{\partial \mathsf{q}^{\mathbf{i}}}{\partial \mathsf{x}_{\mathbf{j}}} \tag{A.13}$$

bzw.

$$\mathsf{E}^{\mathrm{i}\mathrm{k}}\Delta_{\mathrm{k}\mathrm{j}} = \delta^{\mathrm{i}}_{\mathrm{j}}.\tag{A.14}$$

A.2. Konvektierte Koordinatensysteme

Die konvektierten Koordinatensysteme bewegen sich mit dem Fluid, das heißt, ein bestimmtes Fluidelement hat im konvektierten System immer die gleichen Koordinaten

$$q^{i} = q^{i}(x_{1}, x_{2}, x_{3}, t_{0}, t),$$
 (A.15)

nämlich (z.B.) die kartesischen Koordinaten zum Zeitpunkt t_0 . Die konvektierten Basisvektoren sind die Zeilen des Tensors

$$\Delta_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial q_j}.$$
 (A.16)

Die reziproken Basisvektoren sind die Spalten von

$$\mathsf{E}_{ij} = \frac{\partial \mathsf{q}_i}{\partial \mathsf{x}_j} \,. \tag{A.17}$$

Ein benachbartes Fluidelement am Ort $\boldsymbol{q} + d\boldsymbol{q}$ liegt zur Zeit t

$$d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} = \mathbf{g}_{i}(\mathbf{q}, t) \cdot \mathbf{g}_{j}(\mathbf{q}, t) dq^{i} dq^{j} = g_{ij}(\mathbf{q}, t) dq^{i} dq^{j}$$
(A.18)

von **q** entfernt. Die $g_{ij}(\mathbf{q},t)$ enthalten die gesamte Information über die Verformung des Fluidelements **q**.

In der homogenen Scherströmung

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \gamma x^2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{A.19}$$

mit $\mathbf{g}_i(0) = \mathbf{e}_i$ gilt $\mathbf{g}_2(t) = \mathbf{e}_2 + \gamma t \mathbf{e}_1$, oder allgemeiner

$$\frac{\partial \mathbf{g}_{i}}{\partial t} = (g_{i})_{k} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_{k}} \quad \text{und} \quad \frac{\partial \mathbf{g}^{i}}{\partial t} = (g^{i})_{k} \frac{\partial u_{k}}{\partial \mathbf{r}} \quad (A.20)$$

A.3. Konvektive Ableitungen

Die obere (kontravariante) konvektierte Ableitung ist definiert als ($\nabla \mathbf{u} = \partial_i \mathbf{u}_i$)

$$\hat{\tau}_{(1)}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \hat{\tau} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \hat{\tau} - (\nabla \mathbf{u})^{\dagger} \cdot \hat{\tau} - \hat{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{u}).$$
(A.21)

Die untere (kovariante) konvektierte Ableitung ist

$$\hat{\tau}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \hat{\tau} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \hat{\tau} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \hat{\tau} + \hat{\tau} \cdot (\nabla \mathbf{u})^{\dagger}.$$
(A.22)

Die Terme zusätzlich zur substantiellen Ableitung resultieren aus der Mitbewegung der teilchenfesten Bezugssysteme. Im Fall der oberen konvektierten Ableitung wählt man die konvektierten Basisvektoren zur Beschreibung, im anderen Fall die reziproken Basisvektoren.

A.4. Eulerbild und Lagrangebild

Im Eulerbild berechnet man die Entwicklung einer Größe an einem festen Ort im Raum. Wenn die Geschwindigkeit nicht verschwindet, betrachtet man zu jedem Zeitpunkt ein anderes Fluidelement. Im konvektierten Bezugssystem ändern sich sowohl die Koordinaten als auch die Basisvektoren.

Im Lagrangebild berechnet man die Entwicklung eines festen Fluidelements, das sich bei nicht verschwindender Geschwindigkeit zu jedem Zeitpunkt an einem anderen Ort befindet. Im konvektierten Bezugssystem betrachtet man einen Punkt mit konstanten Koordinaten. Die Basisvektoren ändern sich mit der Zeit.

A.5. Allgemeinere ABC-Strömung

Die in Kapitel 2 beschriebene Strömung ist der Spezialfall mit n = 0 der Klasse von Strömungen

$$\mathbf{u} = -\frac{A}{\pi} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{z} (\sin^{n+1} \pi x \cos \pi y) + \frac{B}{\pi} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{y} (\sin^{n+1} \pi x \cos \pi z) + \frac{C}{\pi} \operatorname{rot} \mathbf{e}_{x} (\sin^{n} \pi x (\cos \pi y + \sin \pi z))$$
(A.23a)
$$= \sin^{n} \pi x \begin{pmatrix} (A \sin \pi y + B \sin \pi z) \sin \pi x \\ (n+1)A \cos \pi x \cos \pi y + C \cos \pi z \\ (n+1)B \cos \pi x \cos \pi z + C \sin \pi y \end{pmatrix}$$
(A.23b)

mit konstanten Amplituden A, B und C. Die Strömung ist divergenzfrei. Für $n \ge 1$ verschwindet u in den Ebenen mit ganzzahligem x

$$\mathbf{u}\Big|_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}} = \mathbf{0}\,.\tag{A.24}$$

A.5.1. Symmetrien

Für geradzahlige n ergeben sich die in 2.1.1 angegebenen Symmetrietransformationen Für ungerade n sind die Gleichungen invariant unter den Transformationen

$$S_{1}^{1}: \quad x' = x \quad y' = 1 + y \quad z' = 1 + z \quad t' = -t$$

$$S_{2}^{1}: \quad x' = -x \quad y' = y \quad z' = z \quad t' = -t$$

$$S_{3}^{1}: \quad x' = 1 + x \quad y' = 1 + y \quad z' = -z \quad t' = -t ,$$
(A.25)

die die Symmetriegruppe mit den folgenden Transformationen erzeugen

I: Identität (A.26)

$$S_2^1S_1^1$$
: $x' = -x$ $y' = 1 + y$ $z' = 1 + z$ $t' = t$
 $S_3^1S_1^1$: $x' = 1 + x$ $y' = y$ $z' = 1 - z$ $t' = t$
 $S_3^1S_2^1$: $x' = 1 - x$ $y' = 1 + y$ $z' = -z$ $t' = t$
 $S_3^1S_2^1S_1^1$: $x' = 1 - x$ $y' = y$ $z' = 1 - z$ $t' = -t$.

Die Parameter A, B und C wechseln mit den gleichen Transformationen wie in 2.1.1 das Vorzeichen, so daß man sich auch hier auf positive Parameter und den Bereich $(x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 2] \times [0, 2]$ beschränken kann.

A.5.2. Fixpunkte

Gegenüber dem Fall n = 0 ändert sich nur die x-Koordinate der Fixpunkte. Falls für die (positiven) Parameter die Ungleichung

$$C \le B\sqrt{\frac{\alpha^2}{2} + \alpha\sqrt{\frac{5}{4}\alpha^2 - 1}}$$
 mit $\alpha = \frac{A}{B} > \sqrt{\frac{4}{5}}$ (A.27)

gilt, hat das System mindestens einen Fixpunkt im Inneren der Periodizitätsbox. Bei

$$C \le B\sqrt{\frac{\alpha^2}{2} - \alpha\sqrt{\frac{5}{4}\alpha^2 - 1}}$$
(A.28)

sind es sogar zwei. Sei $\gamma = C/A$. Die Fixpunkte liegen bei

$$y_{\pm} = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left(\frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\frac{5}{4} \alpha^2 - 1} \right) ,$$
 (A.29a)

$$z_{\pm} = \frac{1}{\pi} \sin^{-1}(-\alpha \sin \pi y_{\pm}),$$
 (A.29b)

$$\mathbf{x}_{\pm} = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(\frac{\gamma}{n+1} \tan \pi z_{\pm} \right)$$
(A.29c)

$$= \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(-\frac{\gamma}{n+1} \frac{\alpha \sin \pi y_{\pm}}{\sqrt{1-\alpha^2 \sin^2 \pi y_{\pm}}} \right) \,.$$

Im Fall C = 0 mit A = B sind die Geraden

$$\left\{ (x, y, z) \middle| y = \frac{1}{2}, z = \frac{3}{2} \right\}$$
(A.30a)

$$\left\{ (x, y, z) \middle| y = \frac{3}{2}, z = \frac{1}{2} \right\}$$
(A.30b)

ebenfalls Fixpunkte. Der Eigenwert mit dem Eigenvektor in x-Richtung ist null, die anderen Eigenwerte dieser Fixpunkte sind

$$\lambda = \pm (n+1)A\pi \cos \pi x \, \sin^n \pi x. \tag{A.31}$$

Die Eigenvektoren hierzu zeigen in y- bzw. z-Richtung.

A.6. Darstellung des 9-Moden-Modells im Programmcode

Die Zeitableitungen der Amplituden sind in den Dateien vsidA.cc und vsidG.cc im C-Code implementiert. Dieser Code geht davon aus, daß A, G, dA und dG etc. Zeiger auf Felder mit den entsprechenden Daten sind:

A[1]A[9]	Geschwindigkeitsamplituden
G[1]G[9]	Polymeramplituden
X[0]X[2]	Teilchenposition
cu[0]cu[5]	Konformationstensor mit oberer konvektierter Ab- leitung
cl[0]cl[5]	Konformationstensor mit unterer konvektierter Ab- leitung
tau[0]tau[5]	Polymerspannungstensor mit oberer konvektierter Ableitung
dA[1]dA[9]	Zeitableitungen der Geschwindigkeitsamplituden
dG[1]dG[9]	Zeitableitungen der Polymeramplituden
u[0]u[2]	Geschwindigkeit an der Stelle X
dcu[0]dcu[5]	Zeitableitung des Konformationstensors mit oberer konvektierter Ableitung
dcl[0]dcl[5]	Zeitableitung des Konformationstensors mit unterer konvektierter Ableitung
dtau[0]dtau[5]	Zeitableitung des Polymerspannungstensors mit oberer konvektierter Ableitung

Der Parametervektor ist wie folgt aufgebaut.

p[0]p[2]	Wellenzahlen α , β , γ
p[3]p[5]	Reynoldszahl, Deborahzahl und Konzentrationspa-
	rameter

Mit Hilfe der Module vsiN.cc und vsiNR.cc können mehrere Trajektorien gleichzeitig berechnet werden. Dazu ist der ist der Parametervektor um ein Element für die Trajektorienzahl N erweitert: p[6]=N.

Die Felder A und G sind jeweils von 1 bis 9 indiziert, um die gleichen Indizes wie im Kapitel 3 beizubehalten. Man beachte also bei der Zuweisung im aufrufenden Programm, daß die Zeiger jeweils auf die Speicherstelle vor dem tatsächlichen ersten Element des Feldes zeigen müssen.

Diese Alias-Zeiger ermöglichen eine individuelle Zusammenstellung der Felder. So können zum Beispiel neben den Amplituden auch Trajektorien und Polymerkonformationen entlang dieser Trajektorien berechnet werden, ohne daß man von vornherein in der Zuordnung der Daten innerhalb des Feldes festgelegt ist.

Literaturverzeichnis

- [1] J. ARGYRIS, G. FAUST, UND M. HAASE, *Die Erforschung des Chaos*, Vieweg & Sohn, Braunschweig, Wiesbaden, 1995.
- [2] E. BALKOVSKY, A. FOUXON, UND V. LEBEDEV, *Turbulent dynamics of polymer solutions*, Phys. Rev. Lett., 84 (2000), pp. 4765–4768.
- [3] —, *Turbulence of polymer solutions*, Phys. Rev. E, 64 (2001), p. 056301.
- [4] P. BILLINGSLEY, Probability and measure, Wiley series in Probability and Mathematical Statistics, John Wiley & Sons, Inc., New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 2.. Aufl., 1986.
- [5] R. B. BIRD, R. C. ARMSTRONG, UND O. HASSAGER, *Dynamics of polymeric liquids*, Bd. I. (Fluid mechanics), II. (Kinetic theory), John Wiley & Sons, New York, 1987.
- [6] L. BOBERG UND U. BROSA, *Onset of turbulence in a pipe*, Z. Naturf. A: Phys. Sci., 43 (1988), pp. 697–726.
- [7] P. BRADSHAW, *Turbulence*, Bd. 12 in Topics in Applied Physics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2. Aufl., 1978.
- [8] U. BROSA UND S. GROSSMANN, Minimum description of the onset of pipe turbulence, Eur. Phys. J. B, 9 (1999), pp. 343–354.
- [9] C. BUSTAMENTE, J. MARKO, E. SIGGIA, UND S. SMITH, Science, 265 (1994), p. 1599.
- [10] M. CHERTKOV, Polymer stretching by turbulence, Phys. Rev. Lett., 84 (2000), p. 4761.
- [11] A. J. CHORIN UND J. E. MARDSEN, A mathematical introduction to fluid mechanics, Texts in applied mathematics, Springer, New York, Berlin, Heidelberg, 3.. Aufl., 1993.
- [12] COMMITTEE ON BIBLE TRANSLATION, Hrsg., *The Holy Bible, New international version*, International Bible Society, Colorado Springs, 1973.

- [13] A. M. CRAWFORD, PhD thesis, Cornell University, 2004.
- [14] P. G. DE GENNES, *Coil-stretch transition of dilute flexible polymer under ultrahigh velocity gradients*, J. Chem. Phys., 60 (1974), pp. 5030–5042.
- [15] C. R. DOERING UND J. D. GIBBON, *Applied analysis of the Navier-Stokes equations*, Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press, 1995.
- [16] M. DOI UND S. F. EDWARDS, *The Theory of Polymer Dynamics*, International series of monographs on physics, Oxford Science Publications, New York, 1986.
- [17] T. DOMBRE, U. FRISCH, J. GREENE, M. HENON, A. MEHR, UND A. SO-WARD, *Chaotic streamlines in the ABC flows*, J. Fluid. Mech., 167 (1986), pp. 353–391.
- [18] B. ECKHARDT, E. HASCOËT, UND W. BRAUN, Passive fields and particles in chaotic flows, in IUTAM Symposium on Nonlinear Stochastic Dynamics, N. S. Namachchivaya und Y. K. Lin, Hrsg., Solid Mechanics and Its Applications, Kluver Academic Publishers, 2003, pp. 415–424.
- [19] B. ECKHARDT, J. KRONJÄGER, UND J. SCHUMACHER, Stretching of polymers in a turbulent environment, Comp. Phys. Comm., 147 (2002), pp. 538–543.
- [20] B. ECKHARDT UND D. YAO, *Local Lyapunov exponents in chaotic systems*, Physica D, 65 (1992), pp. 100–108.
- [21] U. FRISCH, Turbulence, University Press, Cambridge, 1995.
- [22] H. FUJISAKA, Statistical dynamics generated by fluctuations of local lyapunov exponents, Progr. Theor. Phys., 70 (1983), pp. 1264–1275.
- [23] C. W. GARDINER, Handbook of Stochastic Methods, Springer Series in Synergetics, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1983.
- [24] F. H. GARNER UND A. H. NISSAN, Nature, 158 (1946), pp. 634–635.
- [25] R. J. GORDON UND C. BALAKRISHNAN, Vortex inhibition: A new viscoelastic effect with importance in drag reduction and polymer characterization, J. Appl. Polym. Sci., 16 (1972), pp. 1629–1639.
- [26] P. GRASSBERGER, R. BADII, UND A. POLITI, J. Stat. Phys., 51 (1988), p. 135.
- [27] C. GREBOGI, E. OTT, UND J. A. YORKE, Crises, sudden changes in chaotic attractors, and transient chaos, Physica D, 7 (1983), pp. 181–200.

- [28] W. GREINER, *Theoretische Physik*, Bd. 1 (Mechanik Teil 1), Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 5. Aufl., 1989.
- [29] A. GROISMAN UND V. STEINBERG, *Elastic turbulence in a polymer solution flow*, Nature, 405 (2000), pp. 53–55.
- [30] A. GROISMAN UND V. STEINBERG, *Elastic turbulence in curvilinear flows of polymer solutions*, New. J. Phys., 6 (2004), p. 29.
- [31] S. GROSSMANN, *The onset of shear flow turbulence*, Reviews of Modern Physics, 72 (2000), pp. 603–617.
- [32] J. GUCKENHEIMER UND P. HOLMES, Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems and Bifurcation of Vector Fields, Bd. 42 in Applied Mathematical Sciences, Springer, 1983.
- [33] A. GYR UND H.-W. BEWERSDORFF, *Drag reduction of turbulent flows by additives*, Fluid mechanics and its applications, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1995.
- [34] R. HAU, PONS Wörterbuch für Schule und Studium. Lateinisch Deutsch, Ernst Klett Verlag, Stuttgart, 1986.
- [35] P. HOLMES, J. L. LUMLEY, UND G. BERKOOZ, *Turbulence, coherent structures, dynamical systems, and symmetry*, Cambridge Monographs on Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [36] K. ITO, Stochastic integral, Proc. Imperial Acad. Tokyo, 20 (1944), pp. 519–524.
- [37] H. KANTZ UND P. GRASSBERGER, *Repellers, semi-attractors, and long-lived chaotic transients*, Physica D Nonlinear Phenomena, 17 (1985), pp. 75–86.
- [38] I. KARATZAS UND S. E. SHREVE, Brownian Motion and Stochastic Calculus, Bd. 113 in Graduate Texts in Mathematics, Springer, New York, Berlin, Heidelberg, 2.. Aufl., 1991.
- [39] KATHOLISCHE BIBELANSTALT GMBH, Hrsg., *Die Bibel, Einheitsübersetzung*, Herder, Freiburg im Breisgau, 1980.
- [40] A. N. KOLMOGOROV, Local structure of turbulence in incompressible fluid at very high Reynolds number, Dokl. Acad. Sc. USSR, 30 (1941), pp. 299–302.
- [41] J. KRONJÄGER, W. BRAUN, UND B. ECKHARDT, *Polymer stretching in statio*nary flows, preprint, (2002).
- [42] J. KRONJÄGER, *Numerical studies of viscoelastic shear turbulence*, Diplomarbeit, Philipps-Universität Marburg, 2001.

- [43] L. D. LANDAU UND E. M. LIFSCHITZ, *Course of Theoretical Physics*, Bd. 6. Fluid Mechanics, Pergamon Press, Oxford, 2. Aufl., 1987.
- [44] R. G. LARSON, E. S. G. SHAQFEH, UND S. J. MULLER, A purely viscoelastic instability in taylor-couette flow, J. Fluid Mech., 218 (1990), pp. 573–600.
- [45] G. H. MCKINLEY, J. A. BYARS, R. A. BROWN, UND R. C. ARMSTRONG, Observations on the elastic instability in cone-and-plate and parallel- plate flows of a polyisobutylene boger fluid, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 40 (1991), pp. 201–229.
- [46] J. MOEHLIS, B. ECKHARDT, UND H. FAISST, *Fractal lifetimes in the transition* to turbulence, Chaos, 14 (2004), p. S11.
- [47] J. MOEHLIS, H. FAISST, UND B. ECKHARDT, A low-dimensional model for shear flows, New J. Phys., 6 (2004), p. 56.
- [48] —, Periodic orbits and chaotic sets in a low-dimensional model for shear flows, SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, 4 (2005), pp. 352–376.
- [49] S. J. MULLER, R. G. LARSON, UND E. S. G. SHAQFEH, A purely elastic transition in Taylor-Couette flow, Rheologica Acta, 28 (1989), pp. 499–503.
- [50] C. L. M. H. NAVIER, Mémoire sur les lois du mouvement des fluides, Mém. Acad. Roy. Sci., 6 (1823), pp. 389–440.
- [51] A. M. OBUKHOV, Spectral energy distribution in turbulent flow, Dokl. Akad. Nauk USSR, 1 (1941), pp. 22–24.
- [52] B. K. ØKSENDAL, Stochastic differential equations: an introduction with applications, Universitext, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 5.. Aufl., 2000.
- [53] H. C. ÖTTINGER, *Stochastic Processes in Polymeric Fluids*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1996.
- [54] P. PAKDEL UND G. H. MCKINLEY, *Elastic instability and curved streamlines*, Phys. Rev. Lett., 77 (1996), pp. 2459–2462.
- [55] T. T. PERKINS, D. E. SMITH, R. G. LARSON, UND S. CHU, Science, 268 (1995), p. 83.
- [56] P. PINCUS, *Excluded volume effects and stretched polymer chains*, Macromolecules, 9 (1976), pp. 386–388.
- [57] R. BROCKHAUS VERLAG, Hrsg., Die Heilige Schrift Revidierte Elberfelder Bibel, R. Brockhaus Verlag, Wuppertal, 1986.

- [58] M. REINER, *The Deborah Number*, Physics today, 17 (1964), p. 62.
- [59] J. C. ROTA, Turbulente Strömungen, B. G. Teubner, Stuttgart, 1972.
- [60] P. J. SCHMID UND D. S. HENNINGSON, Stability and Transition in Shear Flows, Bd. 142 in Applied Mathematical Sciences, Springer, New York, Berlin, Heidelberg, 2001.
- [61] H. G. SCHUSTER, Deterministic Chaos, VCH, Weinheim, 1988.
- [62] E. S. G. SHAQFEH, *Purely elastic instabilities in viscometric flows*, Annu. Rev. Fluid Mech., 28 (1996), pp. 129–185.
- [63] D. E. SMITH, H. P. BABCOCK, UND S. CHU, Single-polymer dynamics in steady shear flow, Science, 283 (1999), pp. 1724–1727.
- [64] D. E. SMITH UND S. CHU, Response of flexible polymers to a sudden elongational flow, Nature, 281 (1998), pp. 1335–1340.
- [65] D. R. SMITH, An introduction to continuum mechanics after Truesdell and Noll, Solid mechanics and its applications, Kluwer, Dordrecht, 1993.
- [66] D. SORNETTE UND R. CONT, Convergent multiplicative processes repelled from zero: Power laws and truncated power laws, J. Phys. I France, 7 (1997), pp. 431–444.
- [67] K. R. SREENIVASAN UND C. M. WHITE, The onset of drag reduction by dilute polymer additives, and the maximum drag reduction asymptote, J. Fluid. Mech., 409 (2000), pp. 149–164.
- [68] R. SURESHKUMAR UND A. N. BERIS, Effect of artificial stress diffusivity on the stability of numerical calculations and the flow dynamics of time-dependent viscoelastic flows, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 60 (1995), pp. 53–80.
- [69] R. SURESHKUMAR, A. N. BERIS, UND R. A. HANDLER, Direct numerical simulation of the turbulent channel flow of a polymer solution, Physics of Fluids, 9 (1997), pp. 743–755.
- [70] H. TAKAYASU, A.-H. SATO, UND M. TAKAYASU, Stable infinite variance fluctuations in randomly amplified langevin systems, Physical Review Letters, 79 (1997), pp. 966–969.
- [71] W. TOLLMIEN, Ein allgemeines Kriterium der Instabilität laminarer Geschwindigkeitsverteilungen, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen Math. Phys., 50 (1935), pp. 79–114.

- [72] B. A. TOMS, Some observations on the flow of linear polymer solutions through straight tubes at large reynolds numbers, in Proc. 1st Int. Cong. on Rheology, Bd. 2, Amsterdam, 1949, North-Holland, pp. 135–141.
- [73] L. M. VANCE, A Brief History of English Bible Translations, Vance Pubns, Juli 1993, ch. 2: A Brief History of the King James Bible, pp. 24–30.
- [74] P. S. VIRK, Drag reduction fundamentals, AIChE J., 21 (1975), pp. 625–656.
- [75] F. WALEFFE, On a self-sustaining process in shear flows, Phys. Fluids, 9 (1997).
- [76] K. WEISSENBERG, A continuum theory of rheological phenomena, Nature, 159 (1947), pp. 310–311.
- [77] WWW.GEOMUNDO.COM.SV/CECAMET/SEPTUAGINTA/SEPTUAGINT.HTM, Hrsg., *Die Bibel, Septuaginta (70)*, 1999.
- [78] WWW.LUTHER-BIBEL 1545.DE/CBIB_R.HTM, Hrsg., *Text der unrevidierten Lutherbibel 1545*, Missionsverlag der Lutherischen Gebetsgemeinschaften e.V., 1996.
- [79] WWW.STUDYLIGHT.ORG, Hrsg., Bible, King James Version (1611), studylight.org, 2001–2005.

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Prof. Dr. Bruno Eckhardt für die Betreuung dieser Arbeit und zahlreiche Hinweise und Anregungen bedanken.

Der Arbeitsgruppe ,Komplexe Systeme' danke ich für das gute Arbeitsklima und für Diskussionen nicht nur zum Thema dieser Arbeit, hier besonders Jahan und Tobias. Das Korrekturlesen haben Jörg, Jürgen Vollmer und Jürgen Bührle übernommen, vielen Dank für die zahlreichen guten Hinweise zur Verbesserung des Textes.

Herrn Prof. Dr. Holger Neumann danke ich für die Bereitschaft, das Zweitgutachten zu übernehmen.

Ich danke Marion für die schöne gemeinsam verbrachte Zeit.

Schließlich noch ein besonderer Dank an meine Familie, die im Grunde diese Arbeit erst ermöglicht hat.

Wissenschaftlicher Werdegang

06/1994	Abitur an der Stiftsschule St. Johann Amöneburg
WS 1994 – SS 2001	Studium der Physik an der Philipps-Universität Marburg
10/1996	Vordiplom
07/2001	Diplom
	Titel der Diplomarbeit: "Nichtlineare Dynamik eines Ther-
	morezeptors"
seit 08/2001	Anstellung als wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Ar-
	beitsgruppe Komplexe Systeme am Fachbereich Physik der
	Philipps-Universität Marburg