Einfluss einer Scherströmung auf die thermischen Fluktuationen in einer Flüssigkeit

Von der Universität Bayreuth zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat) genehmigte Abhandlung

> von Lukas Holzer aus Saarbrücken

1. Gutachter: Prof. Dr. Walter Zimmermann

2. Gutachter: Prof. Dr. Holger Stark

Tag der Einreichung: 19.05.2009 Tag des Kolloquiums: 08.10.2009

Für Susanne und Ronja.

Kurzdarstellung

Diese Dissertation beschäftigt sich im ersten Teil mit der Dynamik von Teilchen in einer Scherströmung und den durch die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen Teilchen induzierten Effekten. Andererseits unterliegen kleine suspendierte Teilchen der Brownschen Bewegung, die durch hydrodynamische Fluktuationen des Lösungsmittels verursacht wird. Der Frage, wie sich diese hydrodynamischen Fluktuationen als Funktion der Scherrate von denjenigen in einer ruhenden Flüssigkeit unterscheiden, ist der Hauptteil der Arbeit gewidmet.

Im ersten Teil werden als einfaches Modell für drei festgehaltene Polymere drei Kugeln in einer Scherströmung betrachtet, wobei jede Kugel in einem harmonischen Potential gefangen ist. Die Kugeln werden durch die Strömung aus ihren Ruhelagen ausgelenkt und oberhalb einer kritischen Scherrate und einer mittleren Geschwindigkeit gehen die über das Lösungsmittel wechselwirkenden Kugeln in eine oszillatorische Bewegung über. Die Ergebnisse hierzu wurden in Referenz [11] publiziert.

Im zweiten Teil der Arbeit werden die Fluktuationen des Geschwindigkeitsfeldes in einer Scherströmung mit Hilfe der um das Scherfeld linearisierten Navier-Stokes Gleichungen und der hydrodynamischen Fluktuationstheorie berechnet. Für die Korrelation unter den Geschwindigkeitsfluktuationen entlang der beiden zueinander orthogonalen Richtungen innerhalb der Scherebene ergeben sich gegenüber der ruhenden Flüssigkeit zusätzliche, von der Scherrate abhängige Beiträge. Diese Korrelation der Geschwindigkeiten an zwei unterschiedlichen Punkten \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 , hängt auf komplexe Weise von der Orientierung des Verbindungsvektors $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ab und nimmt invers proportional mit dem Abstand ab: $|\mathbf{r}|^{-1}$.

Die Geschwindigkeitsfluktuationen der Flüssigkeit induzieren stochastische Kräfte auf ein suspendiertes Teilchen. Es sind diejenigen stochastischen Kräfte, die in der Langevin-Gleichung für das Teilchen Eingang finden. In einer ruhenden Flüssigkeit sind diese Kräfte in zwei zueinander orthogonalen Richtungen unkorreliert. In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass diese Kreuzkorrelation in einem Scherfluss endlich und in führender Ordnung proportional zur Scherrate ist.

Die Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen wurden in einer Näherungsrechnung analytisch und unter Einbezug der Wände in einer ebenen Couette-Strömung numerisch berechnet. Die Ergebnisse aus diesen beiden Zugängen stimmen qualitativ überein. Für letzteren Fall konnte bereits in einer ruhenden Flüssigkeit eine Anisotropie der Verteilung der stochastischen Kräfte gefunden werden, wonach in engeren Kanälen die Kräfte parallel zu den Wänden verstärkt und diejenigen senkrecht dazu abgeschwächt werden.

The influence of a shear flow on the thermal fluctuations in a fluid

Abstract

The first part of this thesis is devoted to the dynamics of particles in a shear-flow and to the effects induced by the hydrodynamic interaction between these particles. Furthermore small suspended particles undergo a Brownian motion that is caused by the hydrodynamic fluctuations of the solvent. The question, how these hydrodynamic fluctuations are influenced by the shear-flow, as a function of the shear-rate and in comparison to a fluid at rest, is covered by the second and main part of the work.

In the first part, a simple model for tethered polymers in a shear-flow, namely the motion of three particles held by three harmonic potentials in a shear flow is examined. The beads are deflected out of its equilibrium positions by the finite flow-velocity and above a critical shear-rate and mean velocity the hydrodynamically interacting beads start to oscillate. These results have already been published in reference [11].

In the second part, the velocity fluctuations in a shear-flow are calculated from the linearized Navier-Stokes Equation using the hydrodynamic fluctuation theory. For the correlation between the velocity fluctuations along two orthogonal directions inside the shear plane additional shear dependent contributions in comparison to the fluid at rest have been found. The correlation of the velocity fluctuations at two different points, \mathbf{r}_1 and \mathbf{r}_2 , depends in a complex way on the orientation of $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ and of their distance proportional to $|\mathbf{r}|^{-1}$.

The velocity fluctuations of the solvent induce stochastic forces to a suspended bead. These stochastic forces are used in a Langevin-equation of motion for the spheres. While in a fluid at rest pairwise different components of these forces are uncorrelated, in this work it is shown that a cross-correlation exists that is, in leading order, proportional to the shear-rate.

The correlation of the velocity-fluctuations has been evaluated both analytically in the case without walls and numerically by taking the walls of a Couette-apparatus into account. The solutions of these two variants are qualitatively similar. For the latter case, already in a fluid at rest an anisotropy in the partition-function of the stochastic forces has been found. Here the forces parallel to the wall are amplified and those perpendicular to the wall diminished.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung				
1	Oszillationen von festgehaltenen Kugeln im Scherfluss			
	1.1	Modell	7	
	1.2	Stationäre Kugelpositionen	9	
	1.3	Hopf-Verzweigung	11	
	1.4	Nichtlineare Bewegung	13	
	1.5	Zusammenfassung und Ausblick	14	
2	The	rmische Fluktuationen im Scherfluss	17	
	2.1	Hydrodynamische Gleichungen	19	
	2.2	Fluktuationen um lokales Gleichgewicht	21	
	2.3	Lösung für ein deterministisches Strömungsfeld	22	
	2.4	Linearisieren und Entdimensionalisieren	23	
	2.5	Kraft auf ein Testteilchen	25	
		2.5.1 Zeitabhängiges Strömungsfeld und stochastische Kraft	26	
3	Forr	nalismus am Beispiel einer ruhenden Flüssigkeit	29	
	3.1	Gleichungen für die Fluktuationen	29	
	3.2	Korrelation, Spektrale Dichte und Relaxationsfunktion	30	
		3.2.1 Longitudinale Fluktuationen	30	
		3.2.2 Transversale Fluktuationen	31	
		3.2.3 Symmetrien der Korrelationsmatrix	32	
		3.2.4 Lösungen für die Geschwindigkeitskorrelationen	34	
	3.3	Statische Suszeptibilität	35	
		3.3.1 Maxwell-Boltzmann Verteilung	35	
		3.3.2 Stochastischer Spannungstensor	36	
	3.4	Einfluss auf ein Testteilchen	38	
	3.5	Zusammenhang mit Responsefunktion	39	
	3.6	Zusammenfassung	43	
4	Fluk	tuationen in inkompressibler Scherströmung	45	
	4.1	Bewegungsgleichungen	46	
	4.2	Inkompressible Flüssigkeiten	48	
	4.3	Lösung für das Geschwindigkeitsfeld	50	
	4.4	Geschwindigkeitskorrelationen, linear in der Scherrate	51	
	4.5	Parameterabhängigkeit der Kreuzkorrelation	55	

	4.6	Geschwindigkeitskorrelation in beliebiger Ordnung der Scherrate	61
		4.6.1 Rücktransformation in die Zeit	62
	4.7	Einfluss auf Testteilchen	64
	4.8	Lineare Response	67
	4.9	Zusammenfassung	70
5	Fluk	ktuationen in einer ebenen Couette-Strömung	71
	5.1	Allgemeiner Formalismus	72
		5.1.1 Planare Fouriertransformation	72
		5.1.2 Matrixoperatoren	73
		5.1.3 Funktionenentwicklung senkrecht zu den Wänden	74
		5.1.4 Entwicklung nach der Galerkin Methode	75
		5.1.5 Kompaktschreibweise mit Vektoren und Matrizen	76
	5.2	Symmetrie	79
	5.3	Spektrale Dichte	81
		5.3.1 Spektrale Dichte aus der statischen Korrelation	81
		5.3.2 Spektrale Dichte aus dem hydrodynamischen Spannungstensor	83
	5.4	Haftende Randbedingungen und Inkompressibilität	86
		5.4.1 Funktionensystem	86
		5.4.2 Bewegungsgleichungen für die transversalen Geschwindigkeiten	89
		5.4.3 Mittelwert über ein Zylindervolumen	91
		5.4.4 Ruhende Flüssigkeit	93
		5.4.5 Lineare Scherratenabhängigkeit der Korrelation	103
		5.4.6 Quadratische Scherratenabhängigkeit	119
	5.5	Verallgemeinerung für kompressible Flüssigkeiten	121
		5.5.1 Diagonalisieren der Lösungsmatrizen	121
		5.5.2 Darstellung durch Faltungstensoren	123
		5.5.3 Zeitdarstellung	125
Zι	ısamı	menfassung und Ausblick	129
Ar	nhang	g	133
Α	Her	leitung der Fluktuationsgleichungen	135
в	Line	eare irreversible Thermodynamik	137
	B.1	Einstein Fluktuationstheorie	137
	B.2	Statische Korrelation und Suszeptibilität	139
		B.2.1 Statische Suszeptibilität	140
		B.2.2 Beispiel: Geschwindigkeitsfluktuationen	140
	B.3	Stochastische Kräfte (allgemein)	141
	B.4	Hydrodynamische Fluktuationen	144
	B.5	Zusammenhang mit räumlichen Korrelationen	145
		B.5.1 Beispiel: Geschwindigkeitsfluktuationen	147
С	Fou	rier- und Laplace-Transformation	149

	C.1	Fourier-Transformation	149
		C.1.1 Faltung in der Zeit	150
		C.1.2 Nützliche Eigenschaften der Fourier-Darstellung	150
	C.2	Zeitliche Laplace-Transformation	151
		C.2.1 Matrixpropagatoren	151
		C.2.2 Faltung bei Laplace-Transformation	152
	C.3	Lösung spezieller Faltungsintegrale und Definition der Faltungstensoren	152
		C.3.1 Eigenschaften der Faltungstensoren	155
D	Entv	vicklung der stochastischen Kräfte	157
	D.1	Fourier-Transformation	157
	D.2	Entwicklung senkrecht zu den Wänden	158
Е	Entv	vicklungskoeffizienten	163
	E.1	Matrixoperatoren	164
	E.2	Haftende Randbedingungen	166
		E.2.1 Stochastischer Spannungstensor	168
F	Bess	selfunktionen	169
	F.1	Fourier-Transformation in der Ebene	169
	F.2	Darstellung durch Besselfunktionen	170
Lit	eratı	ırverzeichnis	175

Einleitung

Schergradienten treten in vielen unterschiedlichen Strömungstypen auf, wovon das wohl bekannteste Beispiel die stationäre, ebene Couette-Strömung zwischen zwei planparallelen Platten ist, die sich in entgegengesetzten Richtungen bewegen. Teilchensuspensionen zeigen in Scherströmungen eine reichhaltige Dynamik [1–3], die oft auch von hoher praktischer Relevanz ist. Dabei ist auf der Längenskala der Teilchendurchmesser und Teilchenabstände bei einem Kugel-Feder-Modell für Polymere die Reynoldszahl klein. Trotzdem kann es bereits zu einer komplexen Dynamik dieser Nano- und Mikroteilchen ohne Turbulenz des Lösungsmittels kommen, die dann durch die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen den suspendierten Teilchen, ihrer Brownschen Bewegung oder einem Wechselspiel dieser beiden Effekte verursacht wird [4, 5]. Ein bekanntes Beispiel für komplexe Flüssigkeitsbewegung bei kleiner Reynoldszahl ist die elastische Turbulenz [6, 7].

Die hydrodynamische Wechselwirkung weniger Teilchen kann bereits zu einer Vielzahl von interessanten dynamischen Effekten führen, auch ohne dass die stochastischen Brownschen Bewegungen berücksichtigt werden. Ein Beispiel sind drei sich in einer Flüssigkeit befindlichen und im Gravitationsfeld sinkende Kugeln. Dort führt die hydrodynamische Wechselwirkung zu periodischer Bewegung [8, 9]. Ein weiteres Beispiel ist die dynamische Teilchenbewegung in optisch induzierten Vortizitäten [10]. Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden, ähnlich dem zuerst genannten Beispiel, drei Kugeln betrachtet, die jetzt aber durch drei lineare harmonische Federn festgehalten und einer Scherströmung ausgesetzt werden. Die Minima der zu den Federn korrespondierenden harmonischen Potentiale liegen dabei in einer zur Strömungsrichtung senkrechten Ebene, wodurch die Kugeln an Positionen mit unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten festgehalten werden. Durch die Balance zwischen der Stokes-Reibungskraft und der Federkraft werden die Kugeln somit verschieden weit in Strömungsrichtung ausgelenkt. Die zusätzlich wirkende nichtlineare hydrodynamische Wechselwirkung zwischen den drei Kugeln führt oberhalb einer kritischen Scherrate und einer endlichen Strömungsgeschwindigkeit an den Kugelpositionen zu einer Hopf-Verzweigung. Die Kugeln oszillieren in diesem Bereich anharmonisch in der Flüssigkeit und verändern dadurch das Strömungsfeld, ohne dass weitere aktive Kräfte auftreten. Dies wird in Kapitel 1 und in der Referenz [11] genauer beschrieben.

Motiviert wurden diese Untersuchungen durch aktuelle Experimente, bei denen Polymere oder Teilchen auf Stäbchen befestigt werden, die an Wänden aufgebracht als Strömungssensoren Einsatz finden [12, 13]. Die Polymere sind in der Grenzschicht der Wände einer Scherströmung ausgesetzt und beeinflussen sich gegenseitig durch die hydrodynamische Wechselwirkung. Wird auf diese Weise ein ganzer Polymerteppich an der Wand eines Mikrokanals aufgebracht, so könnte die kollektive Dynamik der Polymere dazu dienen, die Flüssigkeit zu mischen, was für so genannte "Lab-on-a-Chip"-Systeme, also mikroskopische Chemielabore, von großem Interesse ist [14, 15].

Während für das genannte einfache Modell der drei gebundenen Kugeln bereits stark anharmonische, oszillatorische Bewegungen gefunden wurden, ist die Untersuchung der Dynamik von vielen an Wänden befestigten Polymeren in einer Scherströmung das Fernziel. Hierzu ist der nächste Schritt, die einzelnen Kugeln durch aus vielen Kugeln bestehenden Kugel-Feder-Modelle für Polymere zu ersetzen. Die Dynamik von einzelnen Polymeren, die in einer homogenen oder in anderen Potentialströmungen festgehalten werden, wurde bereits eingehend sowohl experimentell [16-19] als auch theoretisch durch die Simulation von Polymermodellen untersucht [20-26]. Hier wird die mittlere Auslenkung durch eine Balance zwischen den deterministischen Strömungseffekten und den thermischen Kräften bestimmt. Erstere möchten das Polymer einfach wie eine gerade Kette in Strömungsrichtung auslenken. Letztere sind bestrebt, das Polymer zu einem kugelförmigen Knäuel zu formen. Durch die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen Polymersegmenten werden beispielsweise die Fluktuationen der Auslenkung eines festgehaltenen Polymers verstärkt, da die einzelnen Polymersegmente durch die hydrodynamische Abschirmung unterschiedlichen, zeitlich veränderlichen Strömungsgeschwindigkeiten ausgesetzt sind. Diese Effekte sind in Scherströmungen noch stärker vorhanden, wodurch, wie im Falle der drei Kugeln, vielseitige dynamische Effekte entstehen.

Zur Bestimmung der Rauschstärke der Brownschen Kräfte kann, falls die Strömung aus einem Potential ableitbar ist, das im thermischen Gleichgewicht gültige Fluktuations-Dissipations Theorem verwendet werden. Diese so genannten stochastischen Kräfte gehen dann in die Langevin-Bewegungsgleichung für das durch die Kugel repräsentierte Polymersegment ein. Während für eine homogene Strömung ein Potential existiert, hat die Scherströmung Rotationsanteile und lässt sich nicht aus einem Potential ableiten, so dass auch das Fluktuations-Dissipations Theorem nicht mehr gelten muss. Möchte man also Polymersimulationen in Scherströmungen durchführen, muss man sich zunächst die Frage stellen, wie die stochastischen Kräfte für die Brownsche Bewegung in einer solchen Scherströmung aussehen.

Dass das Fluktuations-Dissipations Theorem in Scherströmungen von demjenigen in einer Potentialströmung abweicht, wurde bereits mehrfach beschrieben und die Auswirkungen auf verschiedene Systeme untersucht. Auch unterschiedlich motivierte Korrekturansätze wurden vorgeschlagen. So wurde der Einfluss eines Schergradienten auf Teilchensuspensionen durch angepasste Fokker-Planck Gleichungen, mesoskopische Nichtgleichgewichtsthermodynamik oder mit Langevin-Gleichungen untersucht [27–32]. Die Teilchendiffussion wurde dabei vorwiegend unter der Vorraussetzung des lokalen Gleichgewichts der Teilchen abgeleitet und Korrekturen mit zum Teil unterschiedlichen Ergebnissen gefunden. Die veränderte Brownsche Bewegung eines einzelnen frei schwimmenden Teilchens wurde hingegen in der Referenz [33] untersucht. Hierbei wurde die Brownsche Bewegung, nicht wie es in den meisten anderen Arbeiten der Fall ist, entkoppelt von den thermischen Bewegungen des Lösungsmittels betrachtet, sondern es wurde ausgenutzt, dass die stochastischen Kräfte ihren Ursprung in den Geschwindigkeitsfluktuationen der Flüssigkeit haben und somit auch aus diesen abgeleitet werden können [34]. Wenngleich die dort gefundenen Ergebnisse nicht zur Verwendung in einer Brownschen-Dynamik Simulation geeignet sind, soll die grundlegende Idee, das Brownsche Rauschen in Beziehung zu den Geschwindigkeitsfluktuationen der Flüssigkeit zu setzen, die Basis des größten Teils der vorliegenden Arbeit bilden und zusammen mit den in den Referenzen [35–38] gefundenen Beziehungen später in Polymersimulationen Verwendung finden.

Die Voraussetzung für eine Beschreibung des Verhaltens von Polymeren oder Teilchen im Scherfluss ist also die Kenntnis der thermischen Geschwindigkeitsfluktuationen einer gescherten Flüssigkeit in Abwesenheit von suspendierten Teilchen. Diese thermischen Bewegungen einer gescherten, inkompressiblen Flüssigkeit wurden zum Beispiel mit Hilfe einer direkten Simulation der Bewegungsgleichungen für einen festen Parametersatz untersucht [39]. Der Schwerpunkt in Referenz [39] und anderen Arbeiten [40, 41] gilt vornehmlich der durch den Scherfluss veränderten thermischen Energie, welche proportional der Summe über die Autokorrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen ist und welche für verschiedene Simulationsmethoden wichtige Aspekte liefert. Insbesondere konnte kürzlich in der Referenz [40] für die Autokorrelation zwischen den Geschwindigkeitsfluktuationen an zwei verschiedenen Punkten eine komplexe Richtungsabhängigkeit von deren Verbindungsvektor gefunden werden. Es wird sich in der Dissertation zeigen, dass die Energie verstärkenden Korrekturen erst in höherer Ordnung der Scherrate auftauchen. In führender Ordnung der Scherrate ergeben sich stattdessen die Kreuzkorrelationen von Geschwindigkeitsfluktuationen in zwei zueinander senkrechten Richtungen. Wie in dieser Arbeit explizit gezeigt wird, hängen diese Kreuzkorrelationen ebenfalls vom Betrag und von der Orientierung des Abstandsvektors zwischen den beiden Messpunkten ab. Im Fokus der vorliegenden Arbeit liegt die Kreuzkorrelation der beiden Geschwindigkeitskomponenten, welche die Scherebene aufspannen, da diese zusätzliche scherratenabhängige Beiträge zu den stochastischen Kräften, die auf eine suspendierte Kugel wirken, liefern. Da auch der Übergang einer Scherströmung zur Turbulenz durch die Nicht-Normale Kopplung und Verstärkung von Störungen in zwei zueinander senkrechte Richtungen innerhalb der Scherebene erklärt werden kann [42, 43], steht die gefundene Kreuzkorrelation auch hiermit im Zusammenhang.

Das Ziel des Hauptteils dieser Arbeit ist es, die thermischen Fluktuationen in einer Flüssigkeit zu bestimmen, deren Grundströmung eine ebene Couette-Strömung ist, wobei auch der Einfluss der Gefäßwände berücksichtigt werden soll. Es soll weiterhin ein Maß für den Einfluss dieser Geschwindigkeitsfluktuationen des Lösungsmittels auf die Korrelation der stochastischen Kräfte, die auf ein suspendiertes Teilchen wirken, bestimmt werden. Für Simulationen von Kugel-Feder-Modellen unter verschiedenen Bedingungen ist es wünschenswert, dass die gefundenen Ergebnisse als Funktionen der Scherrate, der Teilchenabmessung sowie des Wandabstandes vorliegen.

Hierzu werden die in den Fluktuationen linearisierten Navier-Stokes Gleichungen mit der Methodik der hydrodynamischen Fluktuationen in einer Näherungsrechnung für ein unbegrenztes Gefäß analytisch und für eine ebene Couette Strömung, unter Berücksichtigung der Wände, numerisch gelöst. Es werden sowohl die frequenz-, als auch die zeitabhängigen Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen bis zur quadratischen Ordnung in der Scherrate im Wellenzahlraum bestimmt. Da der Schwerpunkt der Betrachtungen in den Korrekturen niedrigster Ordnung in der Scherrate liegt, werden die stationären Korrelationsbeiträge hiervon außerdem im Ortsraum betrachtet und in Anlehnung an Referenz [34] über ein Teilchenvolumen gemittelt, um ihren Einfluss auf die stochastischen Kräfte zu bestimmen.

Die Dissertation ist wie folgt gegliedert:

Im ersten Kapitel wird die deterministische Dynamik von drei durch Federn festgehaltenen Kugeln, die sich in einer Scherströmung befinden, berechnet und die lineare Stabilität der gefunden stationären Positionen untersucht. Es folgt die Betrachtung der nichtlinearen Dynamik der oszillatorisch instabilen Parameterbereiche.

Beginnend mit dem zweiten Kapitel werden die thermischen Fluktuationen in einer gescherten Flüssigkeit abgeleitet und diskutiert. Zu Beginn von Kapitel 2 wird auf die Besonderheit der Flüssigkeitsfluktuationen im Scherfluss eingegangen, insbesondere in Bezug auf deren Einfluss auf die Brownsche Bewegung einer suspendierten Kugel. Anschließend werden die grundlegenden Bewegungsgleichungen abgeleitet. In Kapitel 3 werden am Beispiel einer ruhenden Flüssigkeit zunächst die wichtigsten Größen eingeführt, die die Fluktuationen charakterisieren. Es werden Herleitungswege und Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Größen erklärt, die in den folgenden Rechnungen als Referenz dienen.

In Kapitel 4 werden zunächst die grundlegenden durch die Scherströmung bedingten Änderungen der Bewegungsgleichungen für die Flüssigkeit abgeleitet und besprochen. Eine Näherung in den Ausgangsgleichungen macht es möglich, einen Teil der durch den Scherfluss verursachten Korrekturen für die transversalen Anteile der Geschwindigkeitsfluktuationen, die eine inkompressible Flüssigkeit beschreiben, analytisch zu berechnen. Die gefundenen Ergebnisse werden ausführlich besprochen.

In Kapitel 5 wird schließlich - sowohl für eine ruhende Flüssigkeit, als auch für eine ebene Couette-Strömung - der Einfluss von Wänden auf die Fluktuationen analysiert. Die Ergebnisse werden mit denjenigen aus der analytischen Rechnung verglichen und Abweichungen hiervon diskutiert.

1 Oszillationen von festgehaltenen Kugeln im Scherfluss

Die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen Blutzellen oder schwimmenden Bakterien, unterschiedlichen Segmenten eines Polymeres oder auch zwischen verschiedenen Polymeren ist auch in Strömungen mit kleinen Reynoldszahlen von nichtlinearer Natur [44]. Diese nichtlineare Wechselwirkung kann dynamische Effekte induzieren, wie zum Beispiel die periodische Bewegung von Kugeln, die in einer Flüssigkeit im Gravitationsfeld sinken [8, 9], die Synchronisation von rotierenden Ketten und Zilien [45, 46] oder die hydrodynamische Kopplung in optischen Vortizitäten [10]. Durch die hydrodynamische Wechselwirkung entsteht im Scherfluss eine komplexe Dynamik frei schwimmender Polymere [17, 19] und sie ist auch verantwortlich dafür, dass viele gelöste Polymere auch überraschende Effekte erzeugen, wie zum Beispiel die elastische Turbulenz [6, 7].

Die Bewegungen von an einem Ende festgehaltenen Polymerketten, die einer homogenen Strömung ausgesetzt sind, wurden ebenfalls bereits experimentell untersucht [16, 18]. Hier finden sich sowohl für die statischen, als auch für die dynamischen Eigenschaften signifikante hydrodynamische Wechselwirkungseffekte [18, 20–22, 26, 47]. Im Scherfluss wurden bisher nur einzelne, an einer Wand festgehaltene Polymere betrachtet [23–25, 48]. Seit kurzem ist es möglich, auch das Verhalten vieler festgehaltener Polymere experimentell zu untersuchen, indem diese auf so genannten "Micropillars" befestigt einer Scherströmung ausgesetzt werden. Hierbei stellen sich folgende Fragen. Welche Dynamik ist für mehrere benachbarte und festgehaltene Polymere in einem Scherfluss zu erwarten? Welche Rolle spielt dabei die hydrodynamische Wechselwirkung?.



Abb. 1.1: In der linken Bildhälfte sind an einer Wand verankerte semiflexible Polymere skizziert, während in der rechten Skizze auf kleinen Stäbchen befestigte flexible Polymere dargestellt sind. In beiden Szenarien sind die Polymere einer linearen Scherströmung ausgesetzt.

Das in diesem Abschnitt untersuchte Modell ist durch die in Abbildung 1.1 skizzierten Szenarien motiviert. An einer Wand befinden sich entweder nebeneinander befestigte semiflexible Polymere (Abbildung 1.1 links) oder Stäbchen, an deren oberen Enden flexible Polymere angebracht sind. In beiden Fällen werden die Polymere durch das Scherfeld in der Wandnähe deformiert. Wesentliche Aspekte dieser beiden Situationen sollen anhand eines einfachen Modells untersucht werden:

- 1. Die Polymere werden durch Kugeln ersetzt und jede Kugel befindet sich in einem harmonischen Potential.
- 2. Die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen den Kugeln im Scherfluss wird berücksichtigt, aber die hydrodynamische Wechselwirkung mit der Wand wird vernachlässigt.

Es bleiben als Modell schließlich drei in einem Scherfluss an unterschiedlichen Positionen durch lineare Federn festgehaltene Kugeln, deren durch die hydrodynamische Wechselwirkung verursachte deterministische Dynamik untersucht wird.

Das Kapitel gliedert sich wie folgt: In Abschnitt 1.1 werden die Modellparameter eingeführt und die Bewegungsgleichungen für die Kugeln aufgestellt und erläutert. Im Abschnitt 1.2 werden die stationären Lösungen ermittelt und analysiert. Eine lineare Stabilitätsanalyse liefert im Abschnitt 1.3 die Parameterbereiche, in denen die stationäre Lage der Kugeln linear instabil wird und hin zu einer oszillatorischen Bewegung anwächst ("Hopf-Verzweigung"). Es folgt eine Untersuchung der nichtlinearen Bewegung im Abschnitt 1.4.

Die Ergebnisse dieses Kapitels wurden in Referenz [11] publiziert.

1.1 Modell



Abb. 1.2: Die Lage der drei durch lineare Federn festgehaltenen Kugeln im Scherfluss. Die Ecken des in der yz-Ebene liegenden Dreiecks entsprechen den Positionen der Minima der harmonischen Potentiale, in welchen je eine Kugel gefangen ist. Die gestrichelten Linien sind stellvertretend für die Federn eingezeichnet, die dem harmonischen Potential entsprechen, und zeigen hier eine mögliche Auslenkung der Kugeln durch das Strömungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_x(y), 0, 0)$. Der homogene Anteil $u_0 \hat{e}_x$ entspricht der Geschwindigkeit an der Unterseite des Dreiecks.

Es soll die Dynamik von drei, durch lineare Federn mit der Federkonstanten k in einer Scherströmung festgehaltenen Kugeln mit dem Radius a betrachtet werden. Die Minima \mathbf{R}_i (i = 1, 2, 3) der harmonischen Federpotentiale liegen, wenn keine weiteren Einschränkungen gemacht werden, an den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks mit der Seitenlänge b und der Höhe $H = \frac{1}{2}\sqrt{3}b$, wie es in der Abbildung 1.2 skizziert ist. Die obere Ecke befindet sich somit an der Position $\mathbf{R}_1 = (0, H, 0)$ und die beiden unteren Ecken des Dreiecks liegen an den Positionen $\mathbf{R}_{2,3} = (0, 0, \pm b/2)$. Für die Ergebnisse der numerischen Berechnungen in diesem Kapitel wurde der Abstand b = 5 a gewählt. Die Kugeln an den Federn werden aufgrund ihres Reibungswiderstandes durch die Strömung ausgelenkt. Die Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ soll sich aus einer homogenen Strömung u_0 und einem linearen Scherfluss,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_0 + \dot{\gamma}y, 0, 0) , \qquad (1.1)$$

mit der Scherrate $\dot{\gamma}$ zusammensetzen. Dabei kann der homogene Anteil dadurch entstehen, dass das Dreieck, in Anspielung an die in Abbildung 1.1 dargestellten Szenarien, mit den unteren beiden Potentialminima in einem Abstand $h = \frac{u_0}{\dot{\gamma}}$ in y-Richtung von der Stelle entfernt ist, an der die Gesamtströmung verschwindet, beziehungsweise an der sie ihr Vorzeichen wechselt. Die aktuellen Kugelpositionen $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ für die *i*-te Kugel erhält man aus der Bewegungsgleichung

$$\dot{\mathbf{r}}_{i} = \mathbf{u}(\mathbf{r}_{i}) - \frac{k}{\zeta} \mathbf{r}_{d;i} + \sum_{j \neq i} \left(\mathbf{u}_{\dot{\gamma}}(\mathbf{r}_{ij}) - \underline{\Omega}^{RP}(\mathbf{r}_{ij}) k \tilde{\mathbf{r}}_{d;j} \right) , \qquad (1.2)$$

worin die Feder- und Stokeskräfte, sowie die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen den drei Kugeln eingehen. Es ist $\zeta = 6\pi\eta a$ die Stokes Reibungskonstante, die proportional



Abb. 1.3: Die qualitative Wirkung der hydrodynamischen Wechselwirkung: Die grüne Kugel werde durch eine externe Kraft in einer homogenen Strömung festgehalten, wodurch das Strömungsfeld gestört wird. Die rote Kugel spürt hierdurch eine nach rechts unten und die blaue Kugel eine nach rechts oben gerichtete Kraft, die um so stärker ist, je kürzer ihr Abstand zur grünen Kugel ist.

zur Viskosität η der Flüssigkeit ist. $\mathbf{r}_{d;i} = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i$ ist der Vektor für die Auslenkung aus dem Potential und $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ der Abstandsvektor zwischen den Kugelmittelpunkten der beiden Kugeln *i* und *j*.

Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (1.2) beschreibt die ungestörte Strömung aus Gleichung (1.1) und der zweite Beitrag den Einfluss der harmonischen Federkräfte. Jede der drei festgehaltenen Kugeln stört das sie umgebende Strömungsfeld und spürt ihrerseits die von den anderen Kugeln gestörte Strömung. Diese Wechselwirkung der Kugeln über die Flüssigkeit wird als hydrodynamische Wechselwirkung bezeichnet und durch den Rotne-Prager Tensor [44] beschrieben:¹

$$\underline{\Omega}^{RP}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} \left[\left(1 + \frac{2}{3} \frac{a^2}{r^2} \right) \underline{I} + \left(1 - 2\frac{a^2}{r^2} \right) \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right].$$
(1.3)

Hierbei ist $I_{ij} = \delta_{ij}$ die Einheitsmatrix und $r = |\mathbf{r}|$ die Länge von \mathbf{r} . Die qualitative Wirkung der hydrodynamischen Wechselwirkung ist in der Abbildung 1.3 skizziert.

Neben der Translationsgeschwindigkeit wird das Strömungsfeld außerdem durch die Rotation jeder Kugel im Scherfeld beeinflusst. Die damit verbundene zusätzliche Störung der Strömung an den Positionen der anderen Kugeln ist im dritten Term der Gleichung (1.2) berücksichtigt. Seine explizite Darstellung ist gegeben durch [49]

$$\mathbf{u}_{\dot{\gamma}}(\mathbf{r}) = \left(-\frac{5}{2}\left(\frac{a}{r}\right)^3 + \frac{20}{3}\left(\frac{a}{r}\right)^5\right) \frac{\mathbf{r} \cdot \underline{E} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \mathbf{r} - \frac{8}{3}\left(\frac{a}{r}\right)^5 \underline{E} \cdot \mathbf{r}, \qquad (1.4)$$

wobei $E_{ij} = \frac{\dot{\gamma}}{2} (\delta_{ix} \delta_{jy} + \delta_{iy} \delta_{jx})$ ist, falls die Kugel im Abstand **r** frei rotieren kann und $E_{ij} = \dot{\gamma} \delta_{iy} \delta_{jx}$, falls ein externes Drehmoment die Rotation der Kugel verhindert. Es soll hier der Fall mit frei rotierenden Kugeln betrachtet werden.

¹ Im Grenzfall großer Abstände geht der Rotne-Prager Tensor in den Oseen-Tensor über, der sich auch in anderem Zusammenhang in Gleichung (3.63) wiederfindet.

Zusammen mit der Relaxationszeit $\tau := \zeta/k$ und dem Kugelradius *a* lassen sich die Zeit $t \to \tau t'$, der Ort $\mathbf{r} \to a\mathbf{r}'$, die Scherrate $\dot{\gamma} \to \frac{1}{\tau}\dot{\gamma}'$ und die homogene Geschwindigkeit durch $u_0 = \frac{a}{\tau}u'_0$ reskalieren und die Gleichungen im Folgenden durch die dimensionslosen Größen $t', \mathbf{r}', \dot{\gamma}'$ und u'_0 beschreiben, so auch die Auslenkung der Kugel aus dem Potentialminimum,

$$\mathbf{r}'_{d;i} = \frac{\mathbf{r}_{d;i}}{a} = \mathbf{r}'_i - \mathbf{R}'_i = \left(x'_{d;i}, y'_{d;i}, z'_{d;i}\right) \,. \tag{1.5}$$

1.2 Stationäre Kugelpositionen

Die nichtlinearen Gleichungen (1.2) besitzen für zeitunabhängige Strömungsfelder $\mathbf{u}'_0(\mathbf{r})$ stationäre Lösungen \mathbf{r}'^0_i , mit $\dot{\mathbf{r}}'^0_i = 0$. Die Kugelauslenkung soll in diesem Fall durch die Vektoren $\mathbf{r}'^0_{d;i} := \mathbf{r}'^0_i - \mathbf{R}'_i = (x'^0_{d;i}, y'^0_{d;i}, z'^0_{d;i})$ beschrieben werden.

Keine hydrodynamische Wechselwirkung

Wenn die Kugeln nicht über die Flüssigkeit wechselwirken, die Summe in Gleichung (1.2) also verschwindet, so wird die Auslenkung jeder Kugel durch die Stokes Reibungskraft $\mathbf{F} = 6\pi\eta a \mathbf{u}(\mathbf{r})$ mit der Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ aus Gleichung (1.1) bestimmt. Mit $\dot{\mathbf{r}}'_i = 0$ erhält man dann für die Komponenten senkrecht zur Strömungsrichtung die stationären Auslenkungen $y'_{d;i} = z'_{d;i} = 0$, so dass die Kugeln in dieser Richtung in ihren Potentialminima $y'_i^0 = R'_{y;i}$ und $z'^0_i = R'_{z;i}$ verharren. Setzt man diese Positionen in die Strömung (1.1) ein, erhält man für die x-Komponente aus der Balance zwischen der Federund der Reibungskraft die stationären Auslenkungen der Kugeln in x-Richtung,

$$x_{d;i}^{\prime 0} = (u_0^{\prime} + \dot{\gamma}^{\prime} R_{y;i}^{\prime}).$$
(1.6)

Für unterschiedliche y-Positionen $R'_{y;i}$ der Potentialminima wird demnach jede Kugel verschieden weit in x-Richtung ausgelenkt. Im Falle des Dreiecks mit der Höhe H' = H/a ergeben sich dann die jeweiligen Positionen wie folgt:

$$\mathbf{r}_{d;1}^{\prime 0} = \left(u_0' + \dot{\gamma}' H'\right) \hat{e}_x , \mathbf{r}_{d;2}^{\prime 0} = \mathbf{r}_{d;3}^{\prime 0} = u_0' \hat{e}_x .$$
(1.7)

Auswirkung der hydrodynamischen Wechselwirkung

Wegen der hydrodynamischen Wechselwirkung zwischen den Kugeln, ändert sich die durch die Strömung verursachte Federauslenkung im Vergleich zum Grenzfall ohne Wechselwirkung, wie es durch die Gleichungen (1.7) beschrieben wird.

Die Berechnung der stationären Lagen wurde für diesen Fall numerisch mit einem selbst erstellten Fortran-Programm für ein Newton-Verfahren durchgeführt, wobei auch auf die NAG-Bibliothek [50] zurückgegriffen wurde. Mit diesem Newton-Verfahren wurden mehrere Lösungen für die stationären Lagen gefunden, von denen die meisten aber instabil gegenüber kleinen Störungen waren. Um die stabilen stationären Lösungen aufzufinden,



Abb. 1.4: Die Abbildung zeigt die stationären vertikalen Auslenkungen $y_{d;3}^{\prime 0} = y_{d;2}^{\prime 0}$ der beiden unteren Kugeln (gestrichelte Linie) und der oberen Kugel $y_{d;1}^{\prime 0}$ (gestrichpunktete Linie), sowie die Verschiebung $z_{d;3}^{\prime 0} = -z_{d;2}^{\prime 0}$ in Richtung der z-Achse (durchgezogene Linie) als Funktion von $u_0^{\prime}/\dot{\gamma}^{\prime}$ und für die dimensionslose Scherrate $\dot{\gamma}^{\prime} = 2.6$.

mussten die Startwerte hinreichend nahe an der Endlösung gewählt werden. Hierzu wurden zunächst die im vorhergehenden Absatz besprochenen Gleichgewichtslagen (1.7) ohne Berücksichtigung der hydrodynamischen Wechselwirkung und für wachsende u'_0 jeweils die zuvor gefundenen stationäre Lagen als Ausgangsposition benutzt.

Die Auslenkung $\mathbf{r}_{d;i}^{\prime 0}$ der Kugeln bei Variation der dimensionslosen homogenen Strömung u'_0 für eine feste Scherrate $\dot{\gamma}' = 2.6$ ist in Abbildung 1.4 als Funktion von $u'_0/\dot{\gamma}'$ dargestellt. Es sollen nun verschiedene Bereiche für u'_0 in der Abbildung 1.4 genauer beschrieben werden. Für $u'_0 = 0$ verschwindet die Geschwindigkeit an den Potentialminima der Kugeln 2 und 3, so dass mit einem endlichen Schergradienten $\dot{\gamma}'$ zunächst nur die obere Kugel 1 verschoben wird. Die Kugel 1 erzeugt jetzt aber eine Störung des Geschwindigkeitsfeldes der Flüssigkeit, welche die Kugeln 2 und 3 nach unten und in z-Richtung nach außen bewegt, wie es in der Kurve in Abbildung 1.4 zu erkennen ist. Dabei sind die vertikalen Auslenkungen gleich groß, $y'_{d;3} = y'_{d;2}^{\prime 0}$, und die horizontalen Auslenkungen $z''_{d;3} = -z''_{d;2}^{\prime 0}$ besitzen unterschiedliche Vorzeichen.

Erhöht man jetzt u'_0 , so wird auch das Strömungsfeld in der Umgebung der unteren Kugeln 2 und 3 endlich, so dass auch diese zu Störungen des Feldes an der Positon der Kugel 1 führen. Diese Störungen sind dort nach unten, also hin zu kleineren *y*-Werten, gerichtet. Somit wird $y'_{d;1}^0$ ebenfalls negativ, bleibt für kleine u'_0 aber weiterhin größer als $y'_{d;3}^0$. In Richtung der *z*-Achse kompensieren sich die von den Kugeln 2 und 3 ausgelösten Störungen an der Stelle der Kugel 1, so dass $z'_{d;1}^0 = 0$ unverändert bleibt. Da sich die Störungen der beiden anderen Kugeln addieren, wird die Kugel 1 für wachsende u'_0 vom Betrag stärker in *y*-Richtung abgelenkt, als die Kugeln 2 und 3. Dadurch wird die relative Distanz zwischen den Kugeln aber kleiner, wodurch sich der Einfluss der Kugel 1 auf die anderen beiden Kugeln verstärkt. Somit vergrößern sich auch die Werte für $|y'_{d;3}|$ und $z'_{d;3}$ als Funktion

von u'_0 .

Dieses qualitative Bild beschreibt den Trend der stationären Lage bis $u'_0 \simeq 20\dot{\gamma}'$. Oberhalb dieses Wertes erreichen überraschenderweise die Auslenkungen ein Extremum und nehmen für wachsende u'_0 wieder kleinere Werte an. Eine Erklärung hierfür findet man, wenn man die Kugelpositionen bei großen Strömungsgeschwindigkeiten u'_0 betrachtet, wenn nämlich die Kugeln wieder nahezu parallel zur *yz*-Ebene angeordnet sind. Die Wechselwirkungskräfte zwischen den Kugeln werden für große u'_0 im Vergleich zu den Stokes-Kräften klein. In diesem Grenzfall ist die Höhe des Dreiecks jedoch kleiner und die Distanz der Kugeln 2 und 3 in *z*-Richtung größer als es ohne Strömung der Fall ist. Dieser Zusammenhang ist eine Konsequenz des komplexen Kräftegleichgewichts zwischen der Federkraft und der nichtlinearen hydrodynamischen Wechselwirkungskraft, so dass es kein einfaches qualitatives Bild, weder für die Deformation des Dreiecks, noch für die schwächer werdenden Auslenkungen der Kugeln oberhalb der Extrema gibt.

1.3 Hopf-Verzweigung



Abb. 1.5: In a.) sind die Wachstumsraten $\sigma(u'_0/\dot{\gamma}')$ für verschiedene Scherraten $\dot{\gamma}'$ als eine Funktion der durch die jeweilige Scherrate geteilten dimensionslosen homogenen Strömung u'_0 und in b.) die zugehörigen Imaginärteile ω dargestellt.

Unmittelbar hinter den in Abbildung 1.4 gezeigten Extrema werden die stationären Kugellagen instabil und durch eine numerische Lösung der dynamischen Bewegungsgleichungen (1.2) erkennt man, dass sich die Kugeln oszillatorisch bewegen.



Abb. 1.6: Im grau hinterlegten Gebiet sind die stationären Auslenkungen linear instabil. An der durchgezogenen Linie am Rande des grau hinterlegten Gebietes findet sich eine superkritische Hopf-Verzweigung und an der gestrichelten Linie ist die Verzweigung subkritisch. Entlang der durchgezogenen Linie am Rande des schraffierten Bereiches, in dem sich die Hopf-Verzweigung hysteretisch verhält, liegt der so genannte saddle-node.

Der Übergang zu oszillatorischer Dynamik kann jetzt mit Hilfe einer linearen Stabilitätsanalyse der stationären Auslenkungen $\mathbf{r}_i^{\prime 0}$ gegen kleine Störungen $\delta \mathbf{r}_i^{\prime}(t)$ gefunden werden. Mit Hilfe des Ansatzes $\mathbf{r}_i^{\prime} = \mathbf{r}_i^{\prime 0} + \delta \mathbf{r}_i^{\prime}(t)$ führt eine Linearisierung der Ausgangsgleichungen (1.2) zu einem Satz von neun linearen Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten,

$$\dot{\mathbf{Y}} = \mathcal{L}(\mathbf{r}_i^{\prime 0})\mathbf{Y} \quad \text{mit} \quad \mathbf{Y}(t) = \left(\delta \mathbf{r}_1^{\prime}, \delta \mathbf{r}_2^{\prime}, \delta \mathbf{r}_3^{\prime}\right),$$
(1.8)

welche die lineare Dynamik einer kleinen Störung $\delta \mathbf{r}'_i(t)$ beschreiben. Die Gleichung (1.8) wird durch den Ansatz $\mathbf{Y} = \exp(\sigma t' \pm i\omega t')\mathbf{Y}_0$ gelöst, womit sie in ein Eigenwertproblem überführt wird.

Die resultierende Wachstumsrate σ besitzt einen endlichem Imaginärteil ω innerhalb eines begrenzten Bereichs von u'_0 , wie es in der Abbildung 1.5 für drei verschiedenen Werte der dimensionslosen Scherrate $\dot{\gamma}'$ dargestellt ist. Der gesamte Bereich für die Parameter $\dot{\gamma}'$ und u'_0 , der gleichzeitig eine positive Wachstumsrate $\sigma(u'_0)$ und eine endliche Frequenz ω aufzeigt, ist durch den schattiert gezeichneten Bereich in Abbildung 1.6 dargestellt und mit "Hopf-Verzweigung" bezeichnet.

Zum Test der Robustheit des Hopf-Übergangs wurden die Aufhängepunkte für die Kugeln 1 und 2 in allen drei Raumrichtungen geändert, so dass die Potentialminima zum einen kein gleichschenkliges Dreieck mehr bildeten und zum anderen das gleichschenklige Dreieck nicht mehr senkrecht zur Strömungsrichtung lag. Die Hopf-Verzweigung blieb erhalten und es ergaben sich die folgenden wesentlichen Trends: Bringt man die Haltepunkte näher zusammen, so wird die hydrodynamische Wechselwirkung verstärkt und die Hopf-Verzweigung tritt in einem größeren Parameterbereich und auch für kleinere Werte von u'_0 auf. Wurde das Dreieck umgedreht, so dass die Kugel 1 bei der kleineren Strömungsgeschwindigkeit lag, so war der Bereich der Hopf-Verzweigung kleiner und nach höheren u'_0 verschoben. Insbesondere ergaben sich durch eine Positionierung der drei Kugeln in einem Poiseuille-Fluss keine neuen qualitativen Trends. Das Verhalten gehorcht weitgehend demjenigen, welches im Rahmen der Überlegungen hier, für ein lineares Scherprofil zu erwarten war.

1.4 Nichtlineare Bewegung



Abb. 1.7: Die Zeitabhängigkeit der Abweichung $x_{e;i}$ vom stationären Schwerpunkt des Dreikugelsystems für Kugel 1 (durchgezogene Linie), 2 (gestrichelte Linie) und 3 (gestrichpunktete Linie) für $\dot{\gamma}' = 2.6$ und $u'_0/\dot{\gamma}' = 35.5$.



Abb. 1.8: Die zu Abbildung 1.7 gehörigen Trajektorien der Kugeloszillationen in der xz-Ebene.

Ein typisches Beispiel für die dreidimensionalen Oszillationsbewegungen der Kugeln projiziert auf die *x*-Achse ist in Abbildung 1.7 dargestellt. Hier sind die Abweichungen der Kugelpositionen $\mathbf{r}'_{e,i} = (x'_{e;i}, y'_{e;i}, z'_{e;i})$ relativ zu ihrem gemeinsamen Schwerpunkt $\mathbf{r}'_s = \sum_{i=1,2,3} \mathbf{r}'^0_i/3$ gezeigt.

Zwei charakteristische Verhaltensweisen können in der Abbildung erkannt werden: Die Kugeln 2 und 3 oszillieren mit einer Phasenverschiebung von π und die Kugel 1 oszilliert in *x*-Richtung mit der doppelten Frequenz der beiden anderen Kugeln.



Abb. 1.9: Die Oszillationsamplitude der Kugel 1 in x-Richtung als Funktion von $u'_0/\dot{\gamma}'$ für $\dot{\gamma}' = 2.6$. Die gepunktete Linie zeigt den oberen Übergang der Hopf-Verzweigung.

Diese doppelte Frequenz der Kugel 1 ist ein Effekt der Projektion auf die x-Achse, wie im Phasenplot in Abbildung 1.8 zu erkennen ist. Die Kugel 1 führt simultane periodische Bewegungen in der x- und z-Richtung durch, so dass die Kugeln 2 und 3 abwechselnd weggestoßen werden. Die Phasendarstellungen in der xy- und der yz-Ebene sind ähnlich.

Entlang der durchgezogenen Linie, die den grau schattierten Bereich in Abbildung 1.6 umgibt, ist die Hopf-Verzweigung superkritisch. Auf der gestrichelten Linie ist sie subkritisch und der Hysteresebereich ist durch die schräge Schraffur gekennzeichnet. Die Oszillationsamplitude von einer Kugel ist in der Abbildung 1.9 als Funktion von $u'_0/\dot{\gamma}'$ für die Scherrate $\dot{\gamma}' = 2.6$ gezeigt. Es ist das superkritische Verhalten am unteren Übergang und die Hysterese am oberen Übergang zu erkennen.

In der Nähe der superkritischen Hopf-Verzweigung sind die Oszillationen harmonisch. Im Gegensatz dazu werden sie weiter weg von diesem Übergang, für größere u'_0 bis in den Hysteresebereich hinein, stark anharmonisch.

1.5 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Teil der Dissertation wurde die Hopf-Verzweigung von drei gebundenen, punktartigen Kugeln in einem linearen Scherfluss bei kleinen Reynoldszahlen untersucht. Die Verzweigung wird durch das Zusammenspiel der nichtlinearen hydrodynamischen Wechselwirkung zwischen den Kugeln und dem Schergradienten induziert. Die Ergebnisse wurden für drei Kugeln gewonnen, die durch lineare Federn in einem senkrecht zur Strömungsrichtung orientierten gleichschenkligen Dreieck festgehalten wurden. Die gefundenen Effekte sind sehr robust gegen verschiedene Änderung der Verankerungspunkte.

Die Ergebnisse können als Anregung für Experimente dienen, in denen mehrere hydrodynamisch wechselwirkende Polymere in einem Scherfluss festgehalten werden. Neben den in der Einleitung bereits genannten Szenarien, in denen die Polymere in der Nähe einer Wand auf kleinen Stäben befestigt werden, bietet es sich auch an, die Polymere an kleinen Kügelchen zu befestigen, die durch Laserfallen in einer Strömung gehalten werden können. Ein weiterer interessanter Aspekt ist, ob die kürzlich diskutierte Drehbewegung von festgehaltenen Polymeren $\left[23,\,25,\,48\right]$ in Bezug zu der hier gefundenen Hopf-Verzweigung steht.

Da die Hopf-Verzweigung wesentlich durch die Nichtlinearität der hydrodynamischen Wechselwirkung induziert wird, ist zu erwarten, dass ein verbessertes Polymermodell und die Berücksichtigung von vielen anstatt von drei Polymeren den Parameterbereich der Oszillationen erweitert und möglicherweise zu chaotischem Verhalten führt. Ein solches Modell kann nichtlineare Federn, unterschiedliche Federkonstanten oder im Falle der semiflexiblen Polymere die Biegeelastizität berücksichtigen und ist in großen Teilen bereits in der Simulationssoftware implementiert.

2 Thermische Fluktuationen im Scherfluss

Wenn man vom Modell der einzelnen Kugeln aus dem vorherigen Kapitel 1 zu der eigentlichen Idee zurückkehrt, die Dynamik von in Scherströmungen festgehaltenen Polymerketten zu untersuchen, so ist zu beachten, dass auf ein Polymer, neben der durch die Strömung induzierten deterministischen Kraft, noch weitere Kräfte wirken, die durch die thermischen Bewegungen der Flüssigkeit entstehen. Entsprechend sind bei Kugel-Feder-Modellen für Polymere neben deterministischen Kräften auch die stochastischen Kräfte zu berücksichtigen. In einer ruhenden Flüssigkeit oder auch in Potentialströmungen lassen sich diese Kräfte, wie unten gezeigt wird, leicht aus der Gleichgewichtsthermodynamik ableiten. In einer Scherströmung befindet sich die Flüssigkeit allerdings im Nichtgleichgewicht und die auf ein suspendiertes Teilchen wirkenden thermischen Kräfte können sich von denen unterscheiden, welche man für eine Flüssigkeit im Gleichgewicht erhält. Es stellt sich bei der Untersuchung der Brownschen Bewegung also die Frage, welche thermischen Kräfte auf ein einzelnes Teilchens (Kugel) in diesem Fall wirken und wie diese von der Scherrate abhängen.

Die Beschreibung der Brownschen Bewegung eines einzelnen, in einer Flüssigkeit suspendierten Teilchens am Ort \mathbf{r}_K , welches sich zusätzlich in einem harmonischen Potential $V = \frac{1}{2}k|\mathbf{r}_K|^2$ befindet, wird durch die bekannte Bewegungsgleichung für die Teilchengeschwindigkeit $\mathbf{u}_K = \frac{d}{dt}\mathbf{r}_K$ beschrieben [51],

$$m\frac{d\mathbf{u}_K}{dt} = -\zeta \mathbf{u}_K - k\mathbf{r}_K + \mathbf{f}^s(t) \,. \tag{2.1}$$

Hierbei ist $\zeta = 6\pi\eta a$ die Stokessche Reibungskonstante für eine Kugel mit Radius *a*, die sich in einer Flüssigkeit mit der Viskosität η bewegt. In einer isotropen Newtonschen Flüssigkeit werden die thermischen Stöße gleichwahrscheinlich aus allen Richtungen kommen, so dass auf die Kugel im zeitlichen Mittel die thermischen Kräfte verschwinden und somit $\langle \mathbf{f}^{S}(t) \rangle = 0$ gilt. Weiterhin kann man annehmen, dass die Stöße zu verschiedenen Zeiten statistisch unabhängig voneinander stattfinden, so dass sich der folgende Ansatz für die Korrelationen der stochastischen Kräfte anbietet:

$$\langle f_i^S(t)f_j^S(t')\rangle = f_{ij}\delta(t-t').$$
(2.2)

Fasst man Ort und Geschwindigkeit in einem Vektor $\mathscr{X} = (\mathbf{r}_K, \mathbf{u}_K)$ zusammen, so lässt sich die Bewegungsgleichung (2.1) durch ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem erster Ordnung beschreiben. Die Lösung $\mathscr{X}(t)$ dieser Gleichungen kann man für große Zeiten t mit Hilfe der Matrix

$$\underline{\mathscr{L}} = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ -\frac{k}{m} & -\frac{\zeta}{m} \end{pmatrix}$$
(2.3)

und dem Null-Vektor $\mathbf{0} := (0, 0, 0)$ formal durch das Integral

$$\mathscr{X}(t) = \int_{-\infty}^{t} d\tau \, e^{\underline{\mathscr{L}}(t-\tau)} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{f}^{s}(t) \end{pmatrix}$$
(2.4)

angeben. Mit der Korrelation für die stochastischen Kräfte aus Gleichung (2.2) kann man somit die Korrelationsmatrix für die Kugelgeschwindigkeiten bestimmen und erhält für die zeitgleiche Korrelation

$$\langle u_{K;i}(t)u_{K;j}(t)\rangle = \frac{f_{ij}}{2m\zeta}.$$
(2.5)

Um die gesuchten Amplituden der Korrelation der stochastischen Kräfte, f_{ij} , zu bestimmen, nimmt man jetzt an, dass sich die Flüssigkeit im thermischen Gleichgewicht befindet und die Kugelgeschwindigkeiten einer Maxwellverteilung genügen. Die Geschwindigkeitskorrelation zu gleichen Zeiten folgt damit aus dem Equipartitionstheorem und es gilt

$$\frac{m}{2} \langle u_{K;i}(0) u_{K;j}(0) \rangle = \frac{k_B T}{2} \delta_{ij} \,. \tag{2.6}$$

Ein Vergleich der beiden Ausdrücke (2.5) und (2.6) für die Geschwindigkeitskorrelation liefert $f_{ij} = 2k_B T \zeta \delta_{ij}$ und damit das Fluktuations-Dissipations Theorem in der Form

$$\langle f_i^S(t)f_j^S(t)\rangle = 2k_B T\zeta \delta_{ij}\delta(t-t'). \qquad (2.7)$$

Für eine Kugel, die sich in einer Scherströmung, $\mathbf{u}_0 = \dot{\gamma} y \hat{e}_x$, mit der Scherrate $\dot{\gamma}$ befindet und ebenfalls durch ein harmonisches Potential am Ursprung festgehalten wird, muss die Bewegungsgleichung (2.1) um den Scherfluss ergänzt werden:

$$m\frac{d\mathbf{u}_K}{dt} = -\zeta \mathbf{u}_K + \zeta \dot{\gamma} y \hat{e}_x - k\mathbf{r} + \mathbf{f}^s(t) \,. \tag{2.8}$$

Löst man diese Gleichung nach der Geschwindigkeit auf, so ergibt sich für ihre Korrelationsmatrix die statische Lösung

$$\langle \mathbf{u}_K(t)\mathbf{u}_K(t)\rangle = \frac{1}{2m\zeta} \begin{pmatrix} f_{xx} + \frac{m}{2k}\dot{\gamma}^2 f_{yy} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{xy} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{xz} & f_{yz} & f_{zz} \end{pmatrix}, \qquad (2.9)$$

wie es im Detail in [36] beschrieben ist. Nimmt man an, dass die stochastischen Kräfte gegenüber dem Fall der ruhenden Flüssigkeit unverändert bleiben und durch (2.2) gegeben sind, so folgt hieraus für die Korrelation

$$\langle \mathbf{u}_K(t)\mathbf{u}_K(t)\rangle = \frac{k_B T}{m} \begin{pmatrix} 1 + \dot{\gamma}^2 \frac{m}{2k} & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (2.10)

Für die Autokorrelation in Strömungsrichtung, $\langle u_{K;x}(t)u_{K;x}(t)\rangle$, gilt dann nicht mehr das aus der Maxwellverteilung gewonnene Equipartitionstheorem (2.6). Durch die Scherströmung befindet sich das System nicht im Gleichgewicht, so dass das Equipartitionstheorem nicht mehr erfüllt sein muss und damit auch das Fluktuations-Dissipations Theorem in der bekannten Form (2.7) nicht mehr vollständig ist. Wie genau die stochastischen Kräfte zu wählen sind, ist eine offene Frage, für die hier näherungsweise eine Antwort gegeben wird. Für frei schwimmende kugelförmige Teilchen gibt es verschiedene Ansätze, die stochastischen Kräfte in einem Scherfluss zu bestimmen, die zum Teil zu unterschiedlichen Ergebnissen führen [27, 28, 30, 31]. An dieser Stelle macht es Sinn, eine Stufe tiefer anzusetzen und die Ursache der stochastischen Kräfte und damit der Brownschen Bewegung zu ergründen. Die Wechselwirkung einer Kugel mit einer sie umgebenen Flüssigkeit ist durch das Gesetz von Faxén gegeben [52]. Es liefert die Kraft auf eine Kugel als Funktion der Geschwindigkeit der Flüssigkeit. Kennt man also die Geschwindigkeitsfluktuationen in einer Flüssigkeit, sollte es möglich sein, daraus durch eine ähnliche Beziehung die stochastischen Kräfte zu bestimmen. Auf diese Art wurden in der Referenz [34] die für eine ruhende Flüssigkeit bekannten Korrelationen der stochastischen Kräfte aus den hydrodynamischen Gleichungen bestimmt und auch für ein im Scherfluss mitschwimmendes Teilchen wurden bereits Lösungen gefunden [33]. Insbesondere ist zu erwarten, dass im Scherfluss die Geschwindigkeiten in x- und y-Richtung korreliert sind, also die Kraftkorrelation f_{xy} in Gleichung (2.9) einen endlichen Wert besitzt.

Die Fluktuationen einer Flüssigkeit werden, ganz ähnlich wie die Brownsche Bewegung einer einzelnen Kugel, selbst durch den Scherfluss verändert. Ziel der folgenden Kapitel ist es daher, die Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen einer Flüssigkeit mit Hilfe der Theorie der hydrodynamischen Fluktuationen herzuleiten. Es wird zum einen eine analytische Näherungslösung für eine unbegrenzte Flüssigkeit berechnet und anschließend der Fall einer Couette-Strömung zwischen zwei begrenzenden Wänden analysiert und zwar für den Fall, dass die Bewegungen am Rand ohne Schlupf sind.

2.1 Hydrodynamische Gleichungen

Die makroskopische Dynamik einfacher Flüssigkeiten wird durch Kontinuumsgleichungen beschrieben. Dabei folgt die Kontinuitätsgleichung [53]

$$\partial_t \rho + \partial_k (\rho u_k) = 0, \qquad (2.11)$$

aus dem Erhaltungsgesetz für die Masse¹ und die Navier-Stokes-Gleichung

$$\rho \partial_t u_i + \rho(u_k \partial_k) u_i = -\partial_i p + F_i^e + \partial_k \sigma_{ik} + \partial_k \xi_{ik} , \qquad (2.12)$$

beschreibt die Impulserhaltung sowie die Dissipation durch die viskose Reibung in der Flüssigkeit. $u_i(\mathbf{r}, t)$ sind die Komponenten des Geschwindigkeitsfeldes, mit $i \in \{1, 2, 3\}$, p ist das Druckfeld, ρ ist die Dichte, $\underline{\sigma}$ ist der deterministische und ξ der stochastische,

¹ Es gilt durchweg die Einsteinsche Summenkonvention, das heißt, es wird über doppelt auftretende Indizes summiert und es gilt zum Beispiel für die Divergenz $\partial_k u_k = \nabla \cdot \mathbf{u}$.

durch thermische Fluktuationen induzierte Anteil des Spannungstensors. F_i^e enthält alle weiteren externen Kraftdichten, wie sie zum Beispiel durch die Scherspannung bei der Scherströmung erzeugt werden oder durch die Bewegung einer suspendierten Kugel in der Flüssigkeit entstehen.

Schließlich erhält man aus der Energieerhaltung eine Gleichung für die Variation der spezifischen Entropie s, also der Entropie pro Masseneinheit,

$$\rho T \big(\partial_t + u_k \partial_k \big) s = \frac{1}{2} \sigma_{ik} \big(\partial_k u_i + \partial_i u_k \big) - \partial_l q_l - \partial_l g_l \,, \tag{2.13}$$

welche in eine Gleichung für die Temperatur T umgeschrieben werden kann. Es sind q_l die Komponenten des deterministischen und g_l die des stochastischen Anteils des Wärmestroms. Die Gleichungen (2.11) - (2.13) beschreiben die makroskopische Flüssigkeitsdynamik, einschließlich der Fluktuationen [54].

Für Newtonsche Flüssigkeiten sind obige Gleichungen noch um die linearen, isotropen Materialgesetze für den Spannungstensor²

$$\sigma_{ik} = \eta \left(\partial_k u_i + \partial_i u_k - \frac{2}{3} \partial_l u_l \delta_{ik} \right) + \zeta \delta_{ik} \partial_l u_l \,, \tag{2.14}$$

und für den Wärmestrom

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \tag{2.15}$$

zu ergänzen. Die Konstanten η und ζ sind die Scher- und Volumenviskosität und κ ist die Wärmeleitfähigkeit.

Der stochastische Spannungstensor für eine Newtonsche Flüssigkeit, deren makroskopische Geschwindigkeit verschwindet, hat einen verschwindenden Mittelwert

$$\langle \xi_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) \rangle = 0 \tag{2.16a}$$

und die Korrelation³ hängt von der Temperatur und der Viskosität wie folgt ab [54],

$$\langle \xi_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) \xi_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle$$

$$= 2k_B T \Big[\eta(\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + \Big(\zeta - \frac{2}{3} \eta \Big) \delta_{ik} \delta_{lm} \Big] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2) \,.$$
(2.16b)

² Die allgemeine Form des Materialgesetzes für den Spannungstensor lautet $\sigma_{ik} = \eta_{iklm} \dot{\epsilon}_{ml}$ mit dem Tensor der Dehnungsrate (*strain-rate*) $\dot{\epsilon}_{ml} = \frac{1}{2} (\partial_m u_l + \partial_l u_m).$

Für isotrope Newtonsche Flüssigkeiten sind nur noch zwei Koeffizienten von η_{iklm} unabhängig voneinander und es gilt die Darstellung [55]

$$\eta_{iklm} = \eta (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + \left(\zeta - \frac{2}{3}\eta\right) \delta_{ik} \delta_{lm} ,$$

mit der Scherviskosität η und der Volumenviskosität ζ .

 3 Wie in Gleichung (B.53) im Anhang B gezeigt wird, folgt mit dem allgemeinen Viskositätstensor η_{iklm} die Korrelation

$$\langle \xi_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1)\xi_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 2k_B T \eta_{iklm} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2)$$

für den stochastischen Spannungstensor.

Der mit \mathbf{g} bezeichnete stochastische Wärmestromanteil besitzt für ein System im Gleichgewicht ebenfalls einen verschwindenden Mittelwert

$$\langle g_i(t,\mathbf{r})\rangle = 0, \qquad (2.17a)$$

und für seine Korrelation gilt

$$\langle g_i(t_1, \mathbf{r}_1)g_k(t_2, \mathbf{r}_2)\rangle = 2\kappa T^2 \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2).$$
(2.17b)

Geht man von einer konstanten Temperatur $T(\mathbf{r}, t) = T_0$ aus, so gelten zusammenfassend die Gleichungen

$$\partial_t \rho + \partial_l (\rho v_l) = 0, \qquad (2.18a)$$

$$\rho \partial_t u_i + \rho(u_k \partial_k) u_i = -\partial_i p + \eta \Delta u_i + \left(\zeta + \frac{\eta}{3}\right) \partial_i \partial_l u_l + F_i^e + \partial_k \xi_{ik} \,, \tag{2.18b}$$

$$\rho T_0 \big(\partial_t s + u_k \partial_k s \big) = \frac{1}{2} \sigma_{ik} \big(\partial_k u_i + \partial_i u_k \big) - \partial_l g_l \,. \tag{2.18c}$$

Hierbei kann der Druck noch durch eine Zustandsgleichung $p(\rho, T)$ ausgedrückt werden. Zur Lösung der Gleichungen müssen außerdem noch die Randbedingungen für die Felder spezifiziert werden. Für so genannte schlupffreie (*no-slip*) oder haftende Randbedingungen verschwindet das Geschwindigkeitsfeld an einer festen Oberfläche, wie zum Beispiel diejenige einer suspendierten harten Kugel oder der Gefäßwände, vollständig und somit auch die Gradienten entlang dieser Flächen. Für eine Wand an der Position y = d, die sich parallel der xz-Ebene erstreckt, gilt damit

$$u_x(x, y = d, z) = u_y(x, y = d, z) = u_z(x, y = d, z) = 0,$$

$$\partial_x \mathbf{u}(x, y = d, z) = \partial_z \mathbf{u}(x, y = d, z) = 0.$$
(2.19)

Ist die Flüssigkeit außerdem inkompressibel, das heißt ρ ist konstant, gilt wegen der Gleichung (2.18a) $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ und man erhält für den Gradienten der *y*-Komponente der Geschwindigkeit in *y*-Richtung, also senkrecht zur Wand, die Bedingung

$$\partial_y u_y(x, y = d, z) = -\partial_x u_x(x, y = d, z) - \partial_z u_z(x, y = d, z) = 0.$$
 (2.20)

2.2 Fluktuationen um lokales Gleichgewicht

Durch äußere Kräfte erzeugte Geschwindigkeitsfelder lassen sich nur in wenigen Fällen durch ein Potential darstellen, so wie zum Beispiel bei der Dehnströmung. In derartigen Fällen kann das Geschwindigkeitspotential wie andere Potentiale und mit Methoden der statistischen Thermodynamik des Gleichgewichts bei der theoretischen Beschreibung von Fluktuationen berücksichtigt werden [55, 56]. Insbesondere beim Fluktuations-Dissipations Theorem kann in diesem Fall der Gleichverteilungssatz verwendet werden, wie es im 3. Kapitel am Beispiel einer ruhenden Flüssigkeit gezeigt wird. Die Scherströmung enthält Rotationsanteile und lässt sich daher nicht durch ein Potential darstellen. Zur Analyse der Dichte- und Geschwindigkeitsfluktuationen sind daher andere Methoden als für Potentialströmungen einzusetzen. Sind die Abweichungen vom thermischen Gleichgewicht aber klein, was bedeutet, dass sich kleine Teilvolumina der Flüssigkeit in einem mit der Strömung mitbewegten System im thermischen Gleichgewicht befinden, so kann man von einem lokalen thermischen Gleichgewicht ausgehen. Die thermischen Fluktuationen des Geschwindigkeitsfelds werden im mitbewegten System vom stochastischen Anteil im Spannungstensor, wie er für eine sich ansonsten in Ruhe befindliche Flüssigkeit gilt und in Gleichung (2.16b) eingeführt wurde, lokal erzeugt. Es wird also angenommen, dass die stochastischen Kräfte unabhängig von der lokalen Geschwindigkeit und der Vorgeschichte des betrachteten Teilvolumens sind.

Die Gesamtgeschwindigkeit der Flüssigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r},t) + \mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ setzt sich aus der deterministischen Hauptströmung $\mathbf{u}_0(\mathbf{r},t)$ und den Fluktuationen $\mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ zusammen. Der Gleichgewichtsmittelwert der Geschwindigkeitsfluktuationen $\langle \mathbf{v}(\mathbf{r},t) \rangle = 0$ verschwindet und somit ist das mittlere Strömungsfeld gerade gleich der deterministischen Strömung, $\langle \mathbf{u}(\mathbf{r},t) \rangle = \mathbf{u}_0(\mathbf{r},t)$. Analog kann die Gesamtdichte durch die Summe $\rho_0(\mathbf{r},t) + \rho(\mathbf{r},t)$, mit der mittleren Dichte $\rho_0(\mathbf{r},t)$ und den im Mittel verschwindenden Dichtefluktuationen $\rho(\mathbf{r},t)$ beschrieben werden. Die Gesamtgeschwindigkeit und die Gesamtdichte erfüllen weiterhin die Gleichungen für Masse-, Impuls- und Energieerhaltung (2.18):

$$\partial_{t}(\rho_{0}+\rho) + \partial_{k}((\rho_{0}+\rho)(u_{0;k}+v_{k})) = 0, \qquad (2.21)$$

$$(\rho_{0}+\rho)\partial_{t}(u_{0;i}+v_{i}) + (\rho_{0}+\rho)(u_{0;k}+v_{k})\partial_{k}(u_{0;i}+v_{i}) = -\partial_{i}p + F_{i}^{e} + \partial_{k}\sigma_{ik} + \partial_{k}\xi_{ik}, \qquad (\rho_{0}+\rho)T(\partial_{t}s + (u_{0;k}+v_{k})\partial_{k}s) = \frac{1}{2}\sigma_{ik}(\partial_{k}(u_{0;i}+v_{i}) + \partial_{i}(u_{0;k}+v_{k})) - \partial_{l}q_{l} - \partial_{l}g_{l}.$$

Für die stochastischen Beiträge $\underline{\xi}$ und **g** gelten weiterhin die Eigenschaften (2.16) und (2.17). In den Gleichungen (2.21) wurde die explizite Nennung der Abhängigkeiten von Ort und Zeit wegen der besseren Übersichtlichkeit vernachlässigt. Auch die Randbedingungen müssen vom gesamten Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r},t) + \mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ erfüllt werden. Da das deterministische Strömungsfeld diese bereits getrennt von den Fluktuationen erfüllt, bedeutet dies, dass die Geschwindigkeitsfluktuationen unabhängig vom deterministischen Strömungsfeld die Bedingungen (2.19) und im inkompressiblen Fall (2.20) an den Wänden erfüllen müssen.

2.3 Lösung für ein deterministisches Strömungsfeld

Mittelt man die Gleichungen (2.21) über die Fluktuationen und stochastischen Spannungen und verwendet die Gleichungen (2.16)-(2.17), so ergeben sich Bewegungsgleichungen für die mittlere Geschwindigkeit $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t)$ und damit für das deterministische Strömungsfeld, ebenso wie für die mittlere Dichte $\rho_0(\mathbf{r}, t)$. Es sollen hier nur zeitunabhängige externe Kräfte betrachtet werden, weshalb nur der Fall einer konstanten Dichte $\rho_0(\mathbf{r}, t) = \rho_0$ und eines stationären Geschwindigkeitsfelds $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r})$ eintritt:

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_0 = 0,$$

$$\rho_0(\mathbf{u}_0 \cdot \nabla) \mathbf{u}_0 = -\partial_i p_0 + \eta \Delta \mathbf{u}_0 + \mathbf{F}^e. \qquad (2.22)$$

Das mittlere Geschwindigkeitsfeld wird somit durch die externen Kräfte \mathbf{F}^{e} zusammen mit den schlupffreien Randbedingungen (2.19) und für inkompressible Flüssigkeiten zusätzlich durch die Bedingung (2.20) an den begrenzenden Flächen bestimmt.

2.4 Linearisieren und Entdimensionalisieren

Die lokalen Geschwindigkeitsfluktuationen $\mathbf{v}(t)$ werden im Vergleich zur mittleren Geschwindigkeit als so klein angenommen, dass die Gleichungen bezüglich der Fluktuationen linearisiert werden können. Vor der Berechnung dieser Fluktuationen sollen zur besseren Unterscheidbarkeit von dimensionsbehafteten und dimensionslosen Größen noch einige Definitionen eingeführt werden.

Die dimensionsbehaftete Gesamtgeschwindigkeit wird mit \bar{u} , die Gesamtdichte mit $\bar{\rho}$ und der Gesamtdruck mit \bar{p} bezeichnet. Die restlichen Größen werden, sofern sie eine Dimension haben, mit einem hochgestellten \vee markiert. Zusammen mit den Fluktuationen $\check{\rho}$, $\check{\mathbf{v}}$ und \check{p} kann man die folgenden Ansätze machen:

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t) = \check{\mathbf{u}}_0(\mathbf{r},t) + \check{\mathbf{v}}(\mathbf{r},t),
\bar{\rho}(\mathbf{r},t) = \check{\rho}_0(\mathbf{r},t) + \check{\rho}(\mathbf{r},t),
\bar{p}(\mathbf{r},t) = \check{p}_0(\mathbf{r},t) + \check{p}(\mathbf{r},t).$$
(2.23)

Unter der Annahme einer homogenen Temperaturverteilung kann die Änderung der Druckfluktuation auch durch

$$d\check{p} = \frac{\check{c}^2}{\gamma} d\check{\rho}$$

ausgedrückt werden. Hierbei ist č die adiabatische Schallgeschwindigkeit und $\gamma = C_p/C_v$ der Quotient aus den spezifischen Wärmen⁴ (nicht zu verwechseln mit der später eingeführten Scherrate $\dot{\gamma}$).

Da die Mittelwerte $\check{\mathbf{u}}_0$, $\check{\rho}_0$ und \check{p}_0 die hydrodynamischen Gleichungen (2.22) erfüllen, erhält man aus (2.21) die in den Fluktuationen linearisierten Gleichungen

$$\partial_t \check{\rho} + \check{\rho}_0(\partial_k \check{v}_k) + \check{u}_{0;k} \partial_k \check{\rho} = 0, \qquad (2.24)$$

$$\check{\rho}_0 \partial_t \check{v}_i + \check{\rho}_0(\check{u}_{0,k} \partial_k) \check{v}_i + \check{\rho}_0(\check{v}_k \partial_k) \check{u}_{0,i}$$

$$= -\frac{\check{c}^2}{\gamma} \partial_i \check{\rho} + \check{\eta} \triangle \check{v}_i + \left(\check{\zeta} + \frac{\check{\eta}}{3}\right) \partial_i (\partial_k \check{v}_k) + \check{F}_i^S.$$

⁴ Wegen der Adiabatengleichung $pV^{\gamma} = const$ gilt $dp/p = -\gamma dV/v$. Mit $dV = -Vd\rho/\rho$ erhält man hieraus $dp/p = \gamma d\rho/\rho$ und mit der Definition der Schallgeschwindigkeit $c^2 = dp/d\rho = p\gamma/\rho$ schließlich die Beziehung $dp = c^2/\gamma d\rho$.

Die Divergenz des stochastischen Spannungstensors $\check{\xi}$ wurde hierin zu der stochastischen Kraftdichte \check{F}^S zusammengefasst:

$$\check{F}_i^S := \partial_k \check{\xi}_{ik} \,. \tag{2.25}$$

Es werden die Grundgrößen reskaliert und entdimensionalisiert, wobei im Folgenden die dimensionslosen Größen wieder ohne Markierung geschrieben werden.

$$\check{r}_{i} = Lr_{i}, \qquad \check{t} = \tau t,
\check{v}_{i} = \frac{L}{\tau} v_{i}, \qquad \check{\rho} = \check{\rho}_{0} \rho, \qquad (2.26)
\check{u}_{0,i} = \frac{L}{\tau} u_{0,i} =: U u_{0,i}, \qquad \check{F}_{i}^{S} = \frac{\check{\rho}_{0} L}{\tau^{2}} F_{i}^{S}.$$

Die reskalierten Gleichungen haben mit der Abkürzung

$$\alpha := \frac{\check{\zeta}}{\check{\eta}} + \frac{4}{3} \tag{2.27}$$

schließlich die Form

$$\partial_t \rho + \partial_k v_k + u_{0;k} \partial_k \rho = 0, \qquad (2.28)$$
$$\partial_t v_i + (u_{0,k} \partial_k) v_i + (v_k \partial_k) u_{0,i} = -c^2 \partial_i \rho + \nu \triangle v_i + \nu (\alpha - 1) \partial_i (\partial_k v_k) + F_i^S,$$

mit der skalierten kinematischen Viskosität, gegeben durch das Inverse der Reynoldszahl Re des Systems,

$$\nu = \operatorname{Re}^{-1} := \frac{\check{\eta}\tau}{\check{\rho}_0 L^2} \tag{2.29}$$

und der dimensionslosen Schallgeschwindigkeit

$$c^2 = \frac{\check{c}^2}{\gamma} \frac{1}{U^2} \,. \tag{2.30}$$

Durch die Wahl der Skalierung für \mathbf{F}^{S} ergibt sich aus (2.25) für die entdimensionalisierte Divergenz des stochastischen Spannungstensors die Beziehung

$$\partial_k \xi_{ik} = F_i^S = \frac{\tau^2}{\check{\rho}_0 L} \check{F}_i^S = \frac{\tau^2}{\check{\rho}_0 L^2} \check{\partial}_k \check{\xi}_{ik} \,,$$

womit seine Korrelation nach Gleichung (2.16b) durch

$$\langle \xi_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) \xi_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 2Q^2 \nu \Big[(\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + (\alpha - 2) \delta_{ik} \delta_{lm} \Big] \times \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2), \qquad (2.31)$$

gegeben ist. Hierbei wurde die folgende Größe eingeführt:

$$Q^2 := \frac{k_B T}{\check{\rho}_0 L^3} \frac{1}{U^2} \,. \tag{2.32}$$

Die tatsächliche Festlegung auf eine charakteristische Länge L geschieht später und kann zum einen die endliche Länge des Systems oder aber der Radius eines Testteilchens sein.

2.5 Kraft auf ein Testteilchen

Wie in der Einleitung bereits erwähnt wurde, entstehen durch die Fluktuationen in der Flüssigkeit Kräfte auf eine suspendierte Kugel. Der Zusammenhang soll in diesem Abschnitt dargestellt werden. Da auf der Oberfläche einer in der Flüssigkeit gelösten Kugel schlupffreie Randbedingungen gelten und außerdem stochastische Kräfte auf die Kugel wirken, treten in der Flüssigkeit zusätzliche Spannungen auf. Der Effekt einer deterministischen Strömung auf eine Kugel lässt sich im Rahmen des Gesetzes von Faxén [52, 57] ermitteln, indem man die auf die Kugel wirkende hydrodynamische Kraft $\check{\mathbf{F}}^h$ berechnet. Befindet sich die Kugel am Ort $\check{\mathbf{r}}_0$ und bewegt sich mit der Geschwindigkeit $\check{\mathbf{u}}_K$ in einem Strömungsfeld $\check{\mathbf{u}}_0(\check{\mathbf{r}})$, so erhält man hiernach diese, auf sie wirkende Kraft, durch Mittelung des Geschwindigkeitsfeldes über die ganze Kugeloberfläche:

$$\check{\mathbf{F}}_{0}^{h} = -\check{\zeta}_{0} \left(\check{\mathbf{u}}_{K} - \frac{1}{\check{O}_{K}} \int_{\check{O}_{K}} d\check{r}^{2} \,\check{\mathbf{u}}_{0} (\check{\mathbf{r}}_{0} + \check{\mathbf{r}}) \right).$$
(2.33)

Hierbei ist $\check{\zeta}_0 = 6\pi \check{\eta}\check{a}$ die Stokessche Reibungskonstante und $\check{O}_K = 4\pi \check{a}^2$ die Oberfläche der Kugel mit Radius \check{a} . Die Bewegungsgleichung für eine Kugel der Masse \check{m} , die sich in einer Flüssigkeit bewegt, ist dann gegeben durch

$$\check{m}\frac{d}{d\check{t}}\check{\mathbf{u}}_K = \check{\mathbf{F}}_0^h.$$
(2.34)

Um im Formalismus des vorangegangenen Abschnitts zu bleiben, sollen auch hier alle Größen durch eine dimensionslose Darstellung beschrieben werden. Benutzt man die selben charakteristischen Größen aus den Gleichungen (2.26)-(2.32), so kann man die hydrodynamische Kraft $\check{\mathbf{F}}^h$ aus Gleichung (2.33) wie folgt durch die dimensionslose Kraft \mathbf{F}^h ausdrücken:

$$\check{\mathbf{F}}^{h} = \check{\rho}_{0} L^{3} \frac{U}{\tau} \mathbf{F}^{h} \,. \tag{2.35}$$

Das Gesetz von Faxén nimmt somit die folgende, entdimensionalisierte Form an:

$$\mathbf{F}_0^h = -\zeta_0 \left(\mathbf{u}_K - \frac{1}{O_K} \int_{O_K} dr^2 \, \mathbf{u}_0(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}) \right).$$
(2.36)

Analog zu der Gleichung (2.33) wurde hierbei die jetzt entdimensionalisierte Reibungskonstante

$$\zeta_0 = 6\pi\nu a \tag{2.37}$$

und die Kugeloberfläche $O_K = 4\pi a^2$ eingeführt.

Für das makroskopische zeitunabhängige Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}_0(\mathbf{r})$ ergibt sich also nach Gleichung (2.36) die Kraft

$$\mathbf{F}_0^h = -\zeta_0 \left(\mathbf{u}_K - \left[\mathbf{u}_0(\mathbf{r}_0) \right]_{O_K} \right), \qquad (2.38)$$

wobei das über die Kugeloberfläche O_K gemittelte deterministische Strömungsfeld durch

$$\left[\mathbf{u}_{0}(\mathbf{r}_{0})\right]_{O_{K}} := \frac{1}{O_{K}} \int_{O_{K}} dr^{2} \,\mathbf{u}_{0}(\mathbf{r}_{0} + \mathbf{r})$$

$$(2.39)$$

gegeben ist.

2.5.1 Zeitabhängiges Strömungsfeld und stochastische Kraft

Es wäre naheliegend, das Gesetz von Faxén auch dazu zu benutzen, die auf eine Kugel wirkenden stochastischen Kräfte $\check{\mathbf{f}}^s(\check{t})$, die Ursache für die Brownschen Bewegungen sind, aus den Geschwindigkeitsfluktuationen der Flüssigkeit abzuleiten. Tatsächlich lässt sich damit die bekannte zeitabhängige Korrelation in einer deterministisch ruhenden Flüssigkeit $\langle \check{\mathbf{f}}^s(\check{t})\check{\mathbf{f}}^s(\check{t}')\rangle = 2k_B T \check{\zeta}_0 \delta(\check{t} - \check{t}')$ nicht bestimmen.⁵ Der Grund ist, dass das Gesetz von Faxén nur für stationäre Strömungen gültig ist, die Gleichungen für die Geschwindigkeitsfluktuationen (2.24) aber ausdrücklich zeitabhängig sind. Eine Ergänzung für zeitabhängige Felder findet sich zum Beispiel in [57] und es gilt mit dem zeitabhängigen Gesamtgeschwindigkeitsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ der Flüssigkeit für die dimensionslose hydrodynamische Kraft auf eine Kugel

$$\mathbf{F}^{h}(\omega) = -\zeta(\omega)\mathbf{u}_{K}(\mathbf{r}_{0},\omega) + \zeta_{0}\left((1+\alpha a)\left[\mathbf{u}(\mathbf{r}_{0},\omega)\right]_{O_{K}} + \frac{1}{3}\alpha^{2}a^{2}\left[\mathbf{u}(\mathbf{r}_{0},\omega)\right]_{V_{K}}\right),$$

mit $\alpha = \sqrt{\frac{\omega}{2\nu}}(1-i), \, \zeta(\omega) = \zeta_0 \left(1 + \alpha a + \frac{1}{9}\alpha^2 a^2\right)$ und der Definition

$$\left[\mathbf{u}(\mathbf{r}_{0},\omega)\right]_{V_{K}} := \frac{1}{V} \int_{V(a)} dr^{3} \mathbf{u}(\mathbf{r}_{0}+\mathbf{r},\omega) \,. \tag{2.40}$$

Drückt man die Gesamtgeschwindigkeit durch $\mathbf{u}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{v}(\mathbf{r}, \omega)$ aus, so kann man die Fluktuationsanteile als stochastische Kräfte zusammenfassen:

$$\mathbf{f}^{s}(\mathbf{r}_{0},\omega) := \zeta_{0} \left((1+\alpha a) \left[\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega) \right]_{O_{K}} + \frac{1}{3} \alpha^{2} a^{2} \left[\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega) \right]_{V_{K}} \right).$$
(2.41)

Mit $\alpha' = \sqrt{\frac{\omega'}{2\nu}}(1-i)$ erhält man nach dyadischer Multiplikation für die Korrelationsmatrix der stochastischen Kräfte schließlich

$$\langle \mathbf{f}^{s}(\mathbf{r}_{0},\omega)\mathbf{f}^{s}(\mathbf{r}_{0},\omega')\rangle := \zeta_{0}^{2} \Big((1+\alpha a)(1+\alpha' a)\langle [\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega)]_{O_{K}} \left[\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega') \right]_{O_{K}} \rangle + \frac{a^{2}}{3}\alpha'^{2}(1+\alpha a)\langle [\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega)]_{O_{K}} \left[\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega') \right]_{V_{K}} \rangle + \frac{a^{2}}{3}\alpha^{2}(1+\alpha' a)\langle [\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega)]_{V_{K}} \left[\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega') \right]_{O_{K}} \rangle + \frac{1}{9}\alpha^{2}\alpha'^{2}a^{4}\langle [\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega)]_{V_{K}} \left[\mathbf{v}(\mathbf{r}_{0},\omega') \right]_{V_{K}} \rangle \Big).$$
(2.42)

Aus dieser Gleichung folgt die bekannte $\delta(t - t')$ -Abhängigkeit für die Korrelationen der stochastischen Kräfte in einer makroskopisch ruhenden Flüssigkeit, ergänzt um weitere zeitabhängige Terme [34]. Wie außerdem in der Referenz [34] gezeigt wird, spielt der letzte Summand in (2.42), die Korrelation der über das Volumen gemittelten Fluktuationsgeschwindigkeiten, die tragende Rolle, um das klassische und in der Zeit δ -korrelierte Ergebnis zu erhalten.

⁵ In entdimensionalisierter Form geht dieser Ausdruck in $\langle \mathbf{f}^s(t)\mathbf{f}^s(t')\rangle = 2Q^2\zeta_0\delta(t-t')$ über.
Ergänzt man die Bewegungsgleichung (2.34) für die Kugel mit der Masse \check{m} um die stochastische Kraft, so erhält man die Langevin-Gleichung

$$\check{m}\frac{d}{d\check{t}}\check{\mathbf{u}}_{K}=\check{\mathbf{F}}_{0}^{h}+\check{\mathbf{f}}^{s}(t)\,.$$
(2.43)

3 Formalismus am Beispiel einer ruhenden Flüssigkeit

Als Vorbereitung zur Berechnung der thermischen Geschwindigkeitsfluktuationen in einer Scherströmung werden diese im vorliegenden Abschnitt für ein ruhendes und unendlich ausgedehntes Flüssigkeitsvolumen bestimmt. Dieser Fall dient als Referenz, bezüglich der die durch den Scherfluss und der Wände bewirkten Änderungen der Fluktuationen diskutiert werden.

3.1 Gleichungen für die Fluktuationen

Für die Berechnung der Geschwindigkeitsfluktuationen hat es sich bewährt, das Geschwindigkeitsfeld in zwei zueinander senkrechte Komponenten zu zerlegen: $\mathbf{v} = \mathbf{v}^l + \mathbf{v}^t$. Mit dieser Aufspaltung wird die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes alleine durch den Anteil \mathbf{v}^l bestimmt, mit $\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{v}^l$ und die Rotation durch den transversalen Anteil \mathbf{v}^t , mit $\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times \mathbf{v}^t = \boldsymbol{\omega}$ und der Vortizität $\boldsymbol{\omega}$.

Somit erhält man aus den linearisierten Gleichungen (2.28) entkoppelte Gleichungen für \mathbf{v}^l und $\boldsymbol{\omega}$, indem man auf die gesamte Gleichung entweder die Divergenz oder die Rotation anwendet. Eine weitere Anwendung der Rotation liefert dann Bewegungsgleichungen für die transversale Geschwindigkeit \mathbf{v}^t . Dies wurde im Anhang A für ein allgemeines, durch externe Kräfte erzeugtes Geschwindigkeitsfeld berechnet, so dass (A.4) und (A.5) für eine im Mittel ruhende Flüssigkeit mit $\mathbf{u}_0 = 0$ die Gleichungen

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{v}^l = 0,$$

$$(\partial_t - \nu \alpha \Delta) \nabla \cdot \mathbf{v}^l + c^2 \Delta \rho = \nabla \cdot \mathbf{F}^S =: H,$$

$$(\partial_t - \nu \Delta) \Delta \mathbf{v}^t = -\nabla \times \nabla \times \mathbf{F}^S := -\mathbf{G},$$
(3.1)

liefern. Die transversale Geschwindigkeit \mathbf{v}^t liegt hierbei in einer Ebene senkrecht zur Richtung der longitudinalen Geschwindigkeit \mathbf{v}^l .

Während die Dichtefluktuationen an die longitudinalen Geschwindigkeitsfluktuationen koppeln, sind die transversalen Komponenten davon völlig unabhängig. In einer inkompressiblen Flüssigkeit, in der die Dichte konstant ist, gilt $\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{v}^l = 0$.

3.2 Korrelation, Spektrale Dichte und Relaxationsfunktion

Durch die Berechnung des Mittelwertes der Gleichung (3.1) fallen die Fluktuationsanteile des Spannungstensors H und **G** aus der Gleichung heraus und es ergibt sich eine lineare, homogene Differentialgleichung für die Geschwindigkeitsfluktuationen [58, Kapitel 5E].

Ist das Flüssigkeitsvolumen sehr groß, so dass es als unendlich ausgedehnt aufgefasst werden kann, so liegt eine Fourierzerlegung bezüglich des Ortes für die Geschwindigkeitsfluktuation

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},t) = \int d\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{v}(\mathbf{r},t) , \qquad \mathbf{v}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{v}(\mathbf{k},t) ,$$

als auch für die Dichtefluktuation nahe. Man erhält für die linearen Differentialgleichungen im reziproken Raum:

$$\partial_t \rho + i \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}^l = 0, \qquad (3.2a)$$

$$(\partial_t + \nu \alpha k^2) i \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}^l - c^2 k^2 \rho = 0, \qquad (3.2b)$$

$$(\partial_t + \nu k^2)k^2 \mathbf{v}^t = 0. \tag{3.2c}$$

3.2.1 Longitudinale Fluktuationen

Nach Konstruktion bietet sich für den longitudinalen Geschwindigkeitsbeitrag der Ansatz $\mathbf{v}^l = v^l \hat{\mathbf{k}}$ mit $\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ an. Dadurch nehmen die Gleichungen (3.2a) und (3.2b) die folgende Form an

$$\begin{split} \partial_t \rho(\mathbf{k},t) + ikv^l(\mathbf{k},t) &= 0 \,, \\ (\partial_t + \nu \alpha k^2) v^l(\mathbf{k},t) + ikc^2 \rho(\mathbf{k},t) &= 0 \,. \end{split}$$

Mit den Anfangsbedingungen $v^{l}(\mathbf{k}, t = 0)$ und $\rho(\mathbf{k}, t = 0)$ zum Zeitpunkt t = 0 können diese mit Hilfe einer Laplace-Transformation

$$v^l({\bf k},s) = \int_0^\infty dt \ e^{ist} v^l({\bf k},t) \,,$$

und der Beziehung (C.13) in das lineare Gleichungssystem

$$-is\rho(\mathbf{k},s) + ikv^{l}(\mathbf{k},s) = \rho(\mathbf{k},t=0),$$

$$(-is+\nu\alpha k^{2})v^{l}(\mathbf{k},s) + ikc^{2}\rho(\mathbf{k},s) = v^{l}(\mathbf{k},t=0)$$
(3.3)

übergeführt werden. Hieraus folgen die Amplituden für die Dichtefluktuationen

$$\rho(\mathbf{k}, s) = \frac{ikv^{l}(\mathbf{k}, t=0) + (is - \nu\alpha k^{2})\rho(\mathbf{k}, t=0)}{s^{2} + i\nu\alpha k^{2}s - k^{2}c^{2}}$$

=: $R_{\rho v^{l}}(k, s)v^{l}(\mathbf{k}, t=0) + R_{\rho\rho}(k, s)\rho(\mathbf{k}, t=0)$,

und die longitudinalen Geschwindigkeitsfluktuationen

$$\begin{aligned} v^{l}(\mathbf{k},s) &= \frac{isv^{l}(\mathbf{k},t=0) + ikc^{2}\rho(\mathbf{k},t=0)}{s^{2} + i\nu\alpha k^{2}s - k^{2}c^{2}} \\ &=: R_{v^{l}v^{l}}(k,s)v^{l}(\mathbf{k},t=0) + R_{v^{l}\rho}(k,s)\rho(\mathbf{k},t=0) \,. \end{aligned}$$

Diese Lösungen besitzen die folgenden komplexen Polstellen

$$s_{1,2}^* = -i\frac{k^2}{2}\nu\alpha \pm \frac{k}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2\alpha^2k^2},$$

und durch Laplace-Rücktransformation ergeben sich daraus nach der Berechnung des Bromwich-Integrals (C.12) schließlich die zugehörigen zeitabhängigen Fourieramplituden

$$\begin{split} \rho(\mathbf{k},t) &= e^{-\frac{\nu}{2}\alpha k^2 t} \Bigg(\cos\left(\frac{kt}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2}\right) + \frac{\nu \alpha k \sin(\frac{kt}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2})}{\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2}} \Bigg) \rho(\mathbf{k},t=0) \\ &- 2ie^{-\frac{\nu \alpha}{2}k^2 t} \frac{\sin(\frac{kt}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2})}{\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2}} v^l(\mathbf{k},t=0) \\ &= R_{\rho\rho}(\mathbf{k},t)\rho(\mathbf{k},t=0) + R_{\rho v^l}(\mathbf{k},t)v^l(\mathbf{k},t=0) , \\ v^l(\mathbf{k},t) &= e^{-\frac{\nu \alpha}{2}k^2 t} \Bigg(\cos\left(\frac{kt}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2}\right) - \frac{\nu \alpha k \sin(\frac{kt}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2})}{\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2}} \Bigg) v^l(\mathbf{k},t=0) \\ &- 2ic^2 e^{-\frac{\nu \alpha}{2}k^2 t} \frac{\sin(\frac{kt}{2}\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2})}{\sqrt{4c^2 - \nu^2 \alpha^2 k^2}} \rho(\mathbf{k},t=0) \\ &= R_{v^l v^l}(\mathbf{k},t)v^l(\mathbf{k},t=0) + R_{v^l \rho}(\mathbf{k},t)\rho(\mathbf{k},t=0) . \end{split}$$

3.2.2 Transversale Fluktuationen

Die Gleichung für den Vektor der transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen (3.2c) besitzt die exponentiell gedämpfte Lösung

$$\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},t) = \mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},t=0)e^{-k^{2}\nu t} \qquad \qquad \text{für } t \ge 0, \qquad (3.4)$$

welche oft als "hydrodynamische Mode" bezeichnet wird [59]. Es handelt sich um harmonische, kollektive Fluktuationen mit der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, welche exponentiell mit der Zeitkonstanten $\tau(k) = \frac{1}{\nu k^2}$ gedämpft werden.

Die Laplace-Transformation

$$\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},s) = \int_{0}^{\infty} dt \ e^{ist} \mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},t)$$
(3.5)

wird mit $s=\omega+i\epsilon$ und dem Konvergenzfaktor $\epsilon>0$ in der oberen Halbebene ausgeführt und man erhält

$$\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},s) = \frac{i}{s+i\nu k^{2}}\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},t=0) = \underline{R}_{v^{t}v^{t}}(\mathbf{k},s)\mathbf{v}(\mathbf{k},t=0).$$
(3.6)

Die hydrodynamische Mode besitzt demnach die Polstelle bei $s = -i\nu k^2$ auf der imaginären Achse und $\underline{R}_{v^tv^t}(\mathbf{k}, s) = \frac{i}{s+i\nu k^2} \underline{I}$ ist die dynamische Relaxationsfunktion des inkompressiblen Geschwindigkeitsfeldes, die die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsauslenkung ins Gleichgewicht beschreibt.

3.2.3 Symmetrien der Korrelationsmatrix

Die Korrelationsmatrix $\underline{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ der Geschwindigkeit ist gegeben durch den thermischen Gleichgewichtserwartungswert des dyadischen Produkts der Geschwindigkeiten an den Orten \mathbf{r} und \mathbf{r}' sowie zu den Zeitpunkten t und t':

$$\underline{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \langle \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}', t') \rangle.$$
(3.7)

Neben der Translationsinvarianz in der Zeit gilt in einem unendlich ausgedehnten isotropen System auch die räumliche Translationsinvarianz:

$$\underline{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r'}, t, t') = \underline{S}(\mathbf{r} + \triangle \mathbf{r}, \mathbf{r'} + \triangle \mathbf{r}, t + \triangle t, t' + \triangle t)$$

Setzt man hier schließlich $\triangle \mathbf{r} = -\mathbf{r}'$ und $\triangle t = -t'$, so kann die Korrelation auch in die Form

$$\underline{S}(\mathbf{r},t) = \langle \mathbf{v}(\mathbf{r},t)\mathbf{v}(0,0) \rangle$$

gebracht werden.

Für die späteren Betrachtungen wird die räumliche Fouriertransformation

$$\underline{S}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t') = \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \underline{S}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')
= \int d\mathbf{r}' \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i(\mathbf{k}' + \mathbf{k})\mathbf{r}'} \underline{S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', 0, t, t')
= \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \underline{S}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', 0, t, t') \int d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}' + \mathbf{k})\mathbf{r}'}
= (2\pi)^3 \underline{S}(\mathbf{k}, t, t') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$$
(3.8)

benötigt, wobei in der zweiten Zeile die räumliche Translationsinvarianz genutzt und in der letzten Zeile $\underline{S}(\mathbf{k}, t, t')$ durch den Ausdruck

$$\underline{S}(\mathbf{k},t,t') := \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}(\mathbf{r},0,t,t')$$

definiert wurde. Die zeitliche Fouriertransformation davon ergibt unter Ausnutzung der zeitlichen Translationsinvarianz

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega,\omega') = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \ e^{i\omega t + i\omega t'} \underline{S}(\mathbf{k},t,t')$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \ e^{i\omega(t-t')} \underline{S}(\mathbf{k},t-t') \int_{-\infty}^{\infty} dt' \ e^{i(\omega+\omega')t'}$$
$$= 2\pi \underline{S}(\mathbf{k},\omega) \delta(\omega+\omega'), \qquad (3.9)$$

wobei

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{r} \ e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}(\mathbf{r},0,t,0)$$
(3.10)

die *spektrale Dichte* der Geschwindigkeitsfluktuationen genannt wird. Die entsprechenden Rücktransformationen sind

$$\underline{S}(\mathbf{k},t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \underline{S}(\mathbf{k},\omega),$$

$$\underline{S}(\mathbf{r},t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}(\mathbf{k},t).$$
(3.11)

Zur Berechnung dieser spektralen Dichte aus der Relaxationsfunktion benötigt man die Laplace-Transformierte der Korrelationsfunktion

$$\underline{\tilde{S}}(\mathbf{k},s) = \int_0^\infty dt \ e^{ist} \underline{S}(\mathbf{k},t) \qquad \qquad \text{für Im } s > 0.$$
(3.12)

Setzt man an dieser Stelle für $\underline{S}(\mathbf{k},t)$ das Fourier-Integral aus (3.11) ein, so erhält man zwischen der Laplace-Transformation der Korrelationsmatrix und der spektralen Dichte die Beziehung

$$\begin{split} \underline{\tilde{S}}\left(\mathbf{k},s\right) &= \int_{0}^{\infty} dt \ e^{ist} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \ e^{-i\omega t} \underline{S}\left(\mathbf{k},\omega\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \ \underline{S}\left(\mathbf{k},\omega\right) \int_{0}^{\infty} dt \ e^{i(s-\omega)t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \ \frac{\underline{S}\left(\mathbf{k},\omega\right)}{\omega-s} \,. \end{split}$$

Umgekehrt kann die spektrale Dichte wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{split} \underline{S}(\mathbf{k},\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{r} \ e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}\left(\mathbf{r},t\right) \\ &= \int_{0}^{\infty} dt \ \int d\mathbf{r} \ e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}\left(\mathbf{r},t\right) + \int_{-\infty}^{0} dt \ \int d\mathbf{r} \ e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}\left(\mathbf{r},t\right) \\ &= \int_{0}^{\infty} dt \ \int d\mathbf{r} \ e^{i\omega t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}\left(\mathbf{r},t\right) - \int_{\infty}^{0} dt \ \int d\mathbf{r} \ e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}\left(-\mathbf{r},-t\right). \end{split}$$

Zusammen mit der aus der Orts- und Zeittranslationsinvarianz ableitbaren Beziehung

$$\underline{S}(-\mathbf{r},-t) = \langle \mathbf{v}(-\mathbf{r},-t)\mathbf{v}(0,0) \rangle = \langle \mathbf{v}(0,0)\mathbf{v}(\mathbf{r},t) \rangle = \underline{S}^{T}(\mathbf{r},t), \qquad (3.13)$$

wird für die spektrale Dichte somit auch die folgende Darstellung möglich

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_0^\infty dt \, \int d\mathbf{r} \, e^{i(\omega+i\epsilon)t - i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}(\mathbf{r},t) - \int_\infty^0 dt \, \int d\mathbf{r} \, e^{i(-\omega+i\epsilon)t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} \underline{S}^T(\mathbf{r},t) \right] \\ = \lim_{\epsilon \to 0} \left(\underline{\tilde{S}}(\mathbf{k},\omega+i\epsilon) + \underline{\tilde{S}}^T(-\mathbf{k},-\omega+i\epsilon) \right),$$
(3.14)

33

was auch einfach durch

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \left(\underline{\tilde{S}}(\mathbf{k},\omega) + \underline{\tilde{S}}^{T}(-\mathbf{k},-\omega)\right) = \left(\underline{\tilde{S}}(\mathbf{k},\omega) + \underline{\tilde{S}}^{\dagger}(\mathbf{k},\omega)\right).$$
(3.15)

ausgedrückt werden kann. Hierbei bedeutet das hochgestellte † "komplex adjungiert".

3.2.4 Lösungen für die Geschwindigkeitskorrelationen

Ausgehend von der stochastischen Differentialgleichung für das Geschwindigkeitsfeld (2.28) soll nun die spektrale Dichtematrix für die transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen berechnet werden. Dazu multipliziert man von rechts dyadisch die transversale Geschwindigkeit $\mathbf{v}^t(0,0)$ am Ort $\mathbf{r} = 0$ und zum Zeitpunkt t = 0 und bestimmt den Gleichgewichtsmittelwert. Dann ergibt sich die folgende Differentialgleichung für die Korrelationsfunktion:

$$\partial_t \Delta S_{v_i^t v_j^t}(\mathbf{r}, t) = \nu \Delta^2 S_{v_i^t v_j^t}(\mathbf{r}, t) \qquad \qquad \text{für } t > 0.$$
(3.16)

Diese Gleichung ist identisch mit derjenigen für die Geschwindigkeitsfluktuationen (3.2c) und es kann daher mit (3.6) unmittelbar die Lösung angegeben werden:

$$\tilde{S}_{v_i^t v_j^t}(\mathbf{k}, s) = \frac{i}{s + i\nu k^2} S_{v_i^t v_j^t}(\mathbf{k}, t = 0) = R_{v^t v^t}(\mathbf{k}, s) S_{v_i^t v_j^t}(\mathbf{k}, t = 0).$$
(3.17)

Entsprechend erhält man für die longitudinalen Komponenten

$$\tilde{S}_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k},s) = R_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k},s)S_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k},t=0).$$
(3.18)

Die statische Korrelation $\underline{S}_{vv}(\mathbf{k}, t = 0)$ der Geschwindigkeitsfluktuationen kann zumindest im Grenzfall $\mathbf{k} \to 0$ durch die entdimensionalisierte statische Suszeptibilität $\underline{\chi}_{v_i v_j} = \rho_0 V \underline{\check{\chi}}_{v_i v_j}$ ausgedrückt werden,

$$\lim_{\mathbf{k}\to 0} S_{v_i v_j}(\mathbf{k}, t=0) = \frac{k_B T}{\rho_0 V} \frac{1}{U^2} \rho_0 V \check{\chi}_{v_i v_j} = Q^2 \chi_{v_i v_j} , \qquad (3.19)$$

welche die statische Änderung einer Größe aufgrund einer im ganzen Volumen homogen wirkenden konjugierten Kraft \mathbf{F} beschreibt¹, wie es in Anhang B ausführlich aus thermodynamischen Überlegungen heraus abgeleitet wird. Insgesamt ergibt sich aus (B.28) als Näherung für kleine k der Ausdruck

$$\underline{\tilde{S}}_{vv}(\mathbf{k},s) = Q^2 \underline{R}_{vv}(\mathbf{k},s) \underline{\chi}_{vv}, \qquad (3.20)$$

¹ Da die statische Suszeptibilität nur für im ganzen Volumen gleich große Kräfte bekannt ist, kann man sie auch hier nur mit der homogenen statischen Korrelation in Verbindung bringen, welche man einfach aus dem Integral über das ganze Volumen, welches nach (C.5), durch den Grenzübergang $\lim_{\mathbf{k}\to 0} \underline{S}(\mathbf{k}, t = 0)$ bestimmt werden kann, berechnet.

wodurch sich am Beispiel der transversalen Komponente der Geschwindigkeitsfluktuationen mit Hilfe von (3.15) die spektrale Dichte

$$\underline{S}_{v^{t}v^{t}}(\mathbf{k},\omega) = Q^{2} \Big(\underline{R}_{v^{t}v^{t}}(\mathbf{k},s=\omega) + \underline{R}_{v^{t}v^{t}}^{*}(\mathbf{k},s=\omega) \Big) \underline{\chi}_{v^{t}v^{t}} \\
= Q^{2} \Big(\frac{i}{\omega + i\nu k^{2}} + \frac{(-i)}{\omega - i\nu k^{2}} \Big) \underline{\chi}_{v^{t}v^{t}} \\
= 2Q^{2} \frac{\nu k^{2}}{\omega^{2} + \nu^{2}k^{4}} \underline{\chi}_{v^{t}v^{t}},$$
(3.21)

mit der zeitabhängigen Lösung

$$\underline{S}_{v^t v^t}(\mathbf{k}, t) = Q^2 e^{-\nu k^2 t} \underline{\chi}_{v^t v^t}$$
(3.22)

ergibt.

3.3 Statische Suszeptibilität

Zur Bestimmung der vollständigen Lösung für die spektrale Dichte fehlt noch die statische Suszeptibilität. Im Rahmen der Einsteinschen Fluktuationstheorie erhält man diese für eine ruhende, isotrope Flüssigkeit aus der Maxwell-Boltzmann Geschwindigkeitsverteilung, wie es zum Beispiel in den Referenzen [58, 60] ausgeführt und im Anhang B zusammengefasst wurde.

Alternativ kann man diese bei Kenntnis der Korrelation der stochastischen Kraftdichten auch direkt durch Lösen der Gleichungen (3.1) für die Geschwindigkeitsfelder berechnen. Bildet man die zeitabhängige Korrelationsmatrix der Geschwindigkeitfluktuationen, so muss diese im Grenzfall $t \to 0$ mit dem Ergebnis aus der Maxwell-Boltzmann Verteilung übereinstimmen.

Während für eine ruhende, unendlich ausgedehnte Flüssigkeit die statische Suszeptibilität über das Equipartitionstheorem aus der Maxwell-Boltzmann Verteilung bestimmt werden kann, ist dies bei Berücksichtigung der Randbedingungen an den Wänden eines endlichen Gefäßes und für Nicht-Potentialströmungen nicht möglich. In diesen Fällen liefert demnach nur der alternative zweite Weg unter bestimmten Voraussetzungen eine Lösung für die Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen. Um daraus Rückschlüsse auf die statische Suszeptibilität zu erhalten, kann dort der erste Weg jedoch formal durchgeführt werden. Es sollen daher an dieser Stelle beide Varianten vorgestellt werden.

3.3.1 Maxwell-Boltzmann Verteilung

Die statische Suszeptibilität der Geschwindigkeitsfluktuationen $\mathbf{v} = \mathbf{v}^l + \mathbf{v}^t$ in entdimensionalisierter Form $\chi_{v_i v_j} = \rho_0 V \check{\chi}_{v_i v_j}$ ist gegeben durch

$$\chi_{v_i v_j} = \delta_{ij} \,, \tag{3.23}$$

wie im einzelnen im Anhang durch Gleichung (B.28) gezeigt wird.

Werden die transversalen Komponenten des Geschwindigkeitsfelds $(\mathbf{v}\perp\mathbf{k})$ betrachtet, so müssen die longitudinalen Anteile von der statischen Suszeptibilität subtrahiert werden. Weiterhin kann in einem unendlich ausgedehnten und isotropen System der Vektor \mathbf{k} mit Hilfe einer orthonormalen Rotationsmatrix <u>D</u> so gedreht werden, dass $\mathbf{k}' = \underline{D} \mathbf{k} = k\hat{\mathbf{e}}_x$ in Richtung der *x*-Achse zeigt. Die statische Suszeptibilität der transversalen Geschwindigkeit für das gedrehte Feld $\mathbf{v}' = \underline{D} \mathbf{v}$ ist dann gegeben durch

$$\chi_{v_i^t v_j^t}^t = (\delta_{ij} - \delta_{ix} \delta_{jx}) = (\delta_{ij} - (\hat{\mathbf{e}}_x \hat{\mathbf{e}}_x)_{ij})$$
$$= (\delta_{ij} - \hat{k}_i' \hat{k}_j'), \qquad (3.24)$$

mit dem Einheitsvektor $\hat{\bf k}'=\frac{{\bf k}'}{|{\bf k}'|}.$ Dreht man das Koordinatensystem zurück, so ergibt sich allgemein

$$\chi_{v_i^t v_j^t}(\hat{\mathbf{k}}) = (\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) \tag{3.25}$$

und der dynamische Strukturfaktor der transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen nimmt die Form

$$S_{v_{i}^{t}v_{j}^{t}}(\mathbf{k},\omega) = 2Q^{2} \frac{\nu k^{2}}{\omega^{2} + \nu^{2}k^{4}} (\delta_{ij} - \hat{k}_{i}\hat{k}_{j})$$
(3.26)

an. Für die longitudinale Komponente gilt dann mit $\chi_{v^l v^l}(\hat{\mathbf{k}}) = 1$ entsprechend

$$S_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k},\omega) = Q^{2} \left(R_{v^{l}v^{l}}(s=\omega,\mathbf{k}) + R_{v^{l}v^{l}}^{*}(s=\omega,\mathbf{k}) \right) \chi_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k})$$

= $2Q^{2} \frac{\nu \alpha k^{2} \omega^{2}}{(\omega^{2} - k^{2}c^{2})^{2} + \nu^{2} \alpha^{2} k^{4} \omega^{2}}.$ (3.27)

3.3.2 Stochastischer Spannungstensor

Die stochastischen Differentialgleichungen (3.1) im Fourierraum

$$-i\omega\rho(\mathbf{k},\omega) + ikv^{l}(\mathbf{k},\omega) = 0,$$

$$(-i\omega + \nu\alpha k^{2})ikv^{l}(\mathbf{k},\omega) - k^{2}c^{2}\rho(\mathbf{k},\omega) = H(\mathbf{k},\omega),$$

$$(-i\omega + \nu k^{2})k^{2}\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},\omega) = -\mathbf{G}(\mathbf{k},\omega),$$
(3.28)

besitzen die Lösungen

$$\rho(\mathbf{k},\omega) = (\omega^2 + i\nu\alpha k^2\omega - k^2c^2)^{-1}H(\mathbf{k},\omega),$$

$$v^l(\mathbf{k},\omega) = \frac{\omega}{k}(\omega^2 + i\nu\alpha k^2\omega - k^2c^2)^{-1}H(\mathbf{k},\omega),$$

$$\mathbf{v}^t(\mathbf{k},\omega) = -(-i\omega + \nu k^2)\frac{\mathbf{G}(\mathbf{k},\omega)}{k^2}.$$
(3.29)

Damit können die Korrelationsfunktionen für die Dichte- und Geschwindigkeitsfluktuationen durch die Korrelation der Fluktuationen des Spannungstensors ausgedrückt werden:

$$\langle v^{l}(\mathbf{k},\omega)v^{l}(\mathbf{k}',\omega')\rangle = \frac{\omega\omega'}{kk'} (\omega^{2} + i\nu\alpha k^{2}\omega - k^{2}c^{2})^{-1} (\omega'^{2} + i\nu\alpha k'^{2}\omega - k'^{2}c^{2})^{-1} \langle H(\mathbf{k},\omega)H(\mathbf{k}',\omega')\rangle , \langle \rho(\mathbf{k},\omega)\rho(\mathbf{k}',\omega')\rangle = \frac{kk'}{\omega\omega'} \langle v^{l}(\mathbf{k},\omega)v^{l}(\mathbf{k},\omega)\rangle , \langle \mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},\omega)\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k}',\omega')\rangle = (-i\omega + \nu k^{2})^{-1}(-i\omega' + \nu k'^{2})^{-1}\frac{\langle \mathbf{G}(\mathbf{k},\omega)\mathbf{G}(\mathbf{k}',\omega')\rangle}{k^{2}k'^{2}} .$$
(3.30)

Mit den im Anhang D explizit berechneten Korrelationen für $H(\mathbf{k}, \omega)$ und $\mathbf{G}(\mathbf{k}, \omega)$, Gleichungen (D.4) und (D.8), folgen aus Gleichung (3.30) die Ausdrücke

$$\langle v^{l}(\mathbf{k},\omega)v^{l}(\mathbf{k}',\omega')\rangle = 2Q^{2}(2\pi)^{4} \frac{\nu\alpha k^{2}\omega^{2}}{(\omega^{2}-k^{2}c^{2})^{2}+\nu^{2}\alpha^{2}k^{4}\omega^{2}} \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\delta(\omega+\omega')\rangle ,$$

$$\langle \rho(\mathbf{k},\omega)\rho(\mathbf{k}',\omega')\rangle = \frac{k^{2}}{\omega^{2}} \langle v^{l}(\mathbf{k},\omega)v^{l}(\mathbf{k}',\omega')\rangle ,$$

$$\langle \mathbf{v}^{t}(\mathbf{k},\omega)\mathbf{v}^{t}(\mathbf{k}',\omega')\rangle = 2Q^{2}(2\pi)^{4} \frac{\nu k^{2}}{\omega^{2}+\nu^{2}k^{4}} (\underline{I}-\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\delta(\omega+\omega')\rangle ,$$

$$(3.31)$$

und daraus ergeben sich nach einer Fouriertransformation über die gestrichenen Größen die spektralen Dichten

$$S_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k},\omega) = 2Q^{2} \frac{\nu \alpha k^{2} \omega^{2}}{(\omega^{2} - k^{2}c^{2})^{2} + \nu^{2} \alpha^{2} k^{4} \omega^{2}},$$

$$S_{\rho\rho}(\mathbf{k},\omega) = \frac{k^{2}}{\omega^{2}} S_{v^{l}v^{l}}(\omega,\mathbf{k}),$$

$$S_{v_{i}^{t}v_{j}^{t}}(\mathbf{k},\omega) = 2Q^{2} \frac{\nu k^{2}}{\omega^{2} + \nu^{2} k^{4}} \left(\delta_{ij} - \hat{k}_{i} \hat{k}_{j}\right).$$
(3.32)

Die homogene, statische Lösung davon erhält man dann nach Rücktransformation in die Zeit für t = 0 im Grenzübergang $k \to 0$:

$$\underline{S}_{v^{l}v^{l}}(\hat{\mathbf{k}}, t = 0) = Q^{2},
\underline{S}_{v_{i}^{t}v_{j}^{t}}(\hat{\mathbf{k}}, t = 0) = Q^{2}(\delta_{ij} - \hat{k}_{i}\hat{k}_{j}).$$
(3.33)

Wie gewünscht ergeben sich daraus wiederum die statischen Suszeptibilitäten

$$\chi_{v^{l}v^{l}}(\mathbf{k}, t = 0) = 1,$$

$$\chi_{v^{t}_{i}v^{t}_{j}}(\mathbf{k}, t = 0) = \left(\delta_{ij} - \hat{k}_{i}\hat{k}_{j}\right).$$
(3.34)

Der stochastische Spannungstensor gibt also die korrekten, aus der Thermodynamik folgenden Korrelationen wieder.

3.4 Einfluss auf ein Testteilchen

Wie sich aus den Geschwindigkeitsfluktuationen die stochastischen Kräfte ergeben, welche die Brownsche Bewegung einer suspendierten Kugel induzieren, wurde im Abschnitt 2.5 erläutert. Es kann gezeigt werden [34], dass die Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen (3.32) als Hauptbeitrag tatsächlich die bekannte Korrelation der auf eine Kugel im Rahmen der Langevingleichung wirkenden stochastischen Kräfte (hier in entdimansionalisierter Form)

$$\langle f_i^s(t)f_j^s(t')\rangle = 2Q^2\zeta_0\delta(t-t')\delta_{ij} \tag{3.35}$$

erzeugt, wobei $\zeta_0 = 6\pi\nu a$ die dimensionslose Stokessche Reibungskonstante für die Kugel aus Gleichung (2.37) beschreibt.

Bei der numerischen Berechnung der Geschwindigkeitskorrelationen mit Scherfluss und Wänden ist die zeitabhängige Rücktransformation schwer durchzuführen. Es wird daher in den folgenden Schritten angenommen, dass die statischen Geschwindigkeitskorrelationen bereits die wesentlichen Informationen enthalten, um in Gleichung (3.35) die δ -korrelierten Kräfte zu bestimmen. Einen endlichen Wert für die statische Korrelation erhält man nach zweifacher Mittelung über eine Kugel mit dem Volumen² $V_K = \frac{4}{3}\pi a^3$ und es gilt:

$$\left[\left[S_{v_i^t v_j^t}(t=0) \right] \right]_{V_K} := \frac{1}{V_K^2} \int_{V_K} d\mathbf{r} \int_{V_K} d\mathbf{r}' S_{v_i^t v_j^t}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t=0) = \frac{2}{3} \frac{Q^2}{V_K} \delta_{ij} \,. \tag{3.37}$$

Das Verhältnis der bekannten Korrelation der stochastischen Kräfte in x-Richtung aus (3.35) und dieser über das Volumen gemittelten Korrelation der Fluktuationen ist dann

$$\varepsilon := \frac{\langle f_x^s(t) f_x^s(t') \rangle}{\left[\left[S_{v_x^t v_x^t}(t=0) \right] \right]_{V_K}} = 3\zeta_0 V_K \delta(t-t') \,. \tag{3.38}$$

Damit kann die bekannte Korrelation der auf eine Kugel wirkenden stochastischen Kräfte in einer ansonsten ruhenden Flüssigkeit wie folgt ausgedrückt werden:

$$\langle f_i^s(t)f_j^s(t')\rangle = \varepsilon \left[\left[S_{v_i^t v_j^t}(t=0) \right] \right]_{V_K} .$$
(3.39)

Energiedichte

Die entdimensionalisierte spezifische Energie der transversalen Moden ist im Fourierraum gegeben durch $e^t(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} S_{v_i^t v_i^t}(\mathbf{k}, t = 0) = Q^2$. Eine Rücktransformation in den

²Für ein festes **k** gilt mit $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos(\vartheta)$

$$\int_{0}^{a} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} dr d\vartheta d\phi r^{2} \sin(\vartheta) e^{\pm ikr\cos(\vartheta)} = 2\pi \int_{0}^{a} dr \frac{\mp r^{2}}{ikr} \int_{0}^{\pi} d\vartheta \partial_{\vartheta} e^{\pm ikr\cos(\vartheta)}$$
$$= 2\pi \int_{0}^{a} dr \frac{r}{ik} \left(e^{ikr} - e^{-ikr} \right) = 4\pi \int_{0}^{a} dr \frac{r}{k} \sin(kr)$$
$$= 4\pi a^{3} \left(\frac{\sin(ka)}{(ka)^{3}} - \frac{\cos(ka)}{(ka)^{2}} \right).$$
(3.36)

Ortsraum liefert dann $e^t(\mathbf{r}) = Q^2 \delta(\mathbf{r})$. Die mittlere Energiedichte in einem beliebigen Volumen V ist nach (3.37) somit

$$\left[\left[\mathbf{e}^{t}(\mathbf{r})\right]\right]_{V} = \frac{Q^{2}}{V}.$$
(3.40)

Verschwinden der Kreuzkorrelationen

Man erkennt, dass die ursprünglich in der vollen Lösung (3.33) auftretenden Kreuzkorrelationen in den Geschwindigkeitsfluktuationen keinen Effekt auf die suspendierte Kugel haben. Da diese Beiträge antisymmetrisch im Ort sind, fallen sie der Mittelung über die symmetrische Kugel zum Opfer.

3.5 Zusammenhang mit Responsefunktion

Kurze Herleitung der allgemeinen Beziehungen

Die lineare Antwort eines Systems auf eine externe Kraft $\mathbf{h}(\mathbf{r},t)$ wird durch die so genannte Response- oder Dissipationsfunktion $\underline{\chi}''(\mathbf{r},t)$ beschrieben. Die Nichtgleichgewichtsauslenkung der Geschwindigkeit durch eine externe Kraft kann damit wie folgt ausgedrückt werden:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r},t) = 2i \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{r}' \, \underline{\chi}''(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \mathbf{h}(\mathbf{r}', t') \,. \tag{3.41}$$

Aus Kausalitätsgründen kann eine Kraft nur dann einen Einfluss auf die aktuelle Geschwindigkeit haben, wenn sie vor dem betrachteten Zeitpunkt t gewirkt hat, weshalb die obere Integralgrenze nur bis t reicht. Mit der Definition der *dynamischen Suszeptibilität*,

$$\underline{\chi}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t'\right) = 2i\Theta(t-t')\underline{\chi}''(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t'), \qquad (3.42)$$

lässt sich der obige Ausdruck (3.41) mit der Heaviside Stufenfunktion $\Theta(t)$ auch durch das Faltungsintegral

$$\mathbf{v}(\mathbf{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d\mathbf{r}' \,\underline{\chi} \left(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t'\right) \mathbf{h}(\mathbf{r}', t') \tag{3.43}$$

beschreiben.

Im Rahmen des klassischen Fluktuations-Dissipations Theorems besteht nun der folgende Zusammenhang zwischen der spektralen Dichte $\underline{S}(\mathbf{k},\omega)$ und der fouriertransformierten Response-Funktion $\chi''(\mathbf{k},\omega)$ in entdimensionalisierter Form:

$$\underline{\chi}^{\,\prime\prime}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\omega}{2Q^2} \underline{S}\left(\mathbf{k},\omega\right). \tag{3.44}$$

Es soll hier gezeigt werden, dass diese Beziehung im Falle der Geschwindigkeitsfluktuationen in einer im Mittel ruhenden Flüssigkeit gültig ist. Um die Response-Funktion zu berechnen, muss daher zunächst eine Beziehung zwischen dieser und den im Abschnitt 3.2.1 und 3.2.2 abgeleiteten Relaxationsfunktionen hergestellt werden.

Hierzu nimmt man an, dass eine Nichtgleichgewichtsauslenkung der Geschwindigkeit, deren Relaxation ins Gleichgewicht zum Beispiel durch die Gleichungen (3.2) beschrieben wird, adiabatisch durch eine externe Kraft erzeugt wird. Wird diese zum Zeitpunkt t = 0abgeschaltet,

$$\mathbf{h}(\mathbf{r},t) = \mathbf{h}(\mathbf{r}')e^{\epsilon t}\Theta(-t) \qquad \qquad \text{für } \epsilon \to 0 \qquad (3.45)$$

dann gilt für die Geschwindigkeitsänderung aus Gleichung (3.41),

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},t) = 2i \int_{-\infty}^{0} dt' \,\underline{\chi}''(\mathbf{k},t-t') \mathbf{h}(\mathbf{k}') e^{\epsilon t'} \,, \qquad (3.46)$$

wobei das Faltungsintegral im Ort durch ein Produkt im Wellenzahlraum ausgedrückt wurde. Setzt man hier die Fourier-Darstellung von $\underline{\chi}''(\mathbf{k}, t - t')$ im Frequenzraum ein, so lässt sich dies weiter umformen,

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},t) = 2i \int_{-\infty}^{0} dt' \int \frac{d\omega}{2\pi} \underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega) e^{-i\omega(t-t')} \mathbf{h}(\mathbf{k}') e^{\epsilon t'}$$
$$= 2i \int \frac{d\omega}{2\pi} \underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega) e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{0} dt' \mathbf{h}(\mathbf{k}') e^{(\epsilon+i\omega)t'}$$
$$= \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)}{\omega - i\epsilon} \mathbf{h}(\mathbf{k}') e^{-i\omega t} .$$
(3.47)

Die Laplacetransformation von $\mathbf{v}(\mathbf{k},t)$ liefert dann für $\epsilon \to 0$ den Ausdruck

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},s) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)}{\omega} \mathbf{h}(\mathbf{k}') \int_0^\infty dt \ e^{i(s-\omega)t}$$
$$= \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)}{\omega(\omega-s)} \mathbf{h}(\mathbf{k}')$$
(3.48)

und mit Hilfe einer Partialbruchzerlegung bezüglich ω kann man hierfür auch die folgende Darstellung wählen:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},s) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{is} \left(\frac{1}{\omega-s} - \frac{1}{\omega}\right) \underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega) \mathbf{h}(\mathbf{k}) \,. \tag{3.49}$$

Da in den Gleichungen (3.3) und (3.5) aber nicht die die Nichtgleichgewichtsauslenkungen verursachenden Kräfte auftreten, sondern die dadurch entstandene Auslenkung zum Zeitpunkt t = 0 selbst, muss man eine Beziehung zwischen Kraft und Auslenkung finden. Wie

im Anhang B beschrieben, kann man hierzu die Definition der statischen Suszeptibilität aus Gleichung (3.25) benutzen, womit sich

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}, t=0) = \underline{\chi}\left(\mathbf{k}\right)\mathbf{h}(\mathbf{k}) \tag{3.50}$$

ergibt. Aufgelöst nach $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ ergibt sich mit $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = \underline{\chi}(\mathbf{k})^{-1}\mathbf{v}(\mathbf{k}, t = 0)$ aus der Gleichung (3.49):

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},s) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{is} \left(\frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)}{\omega-s} - \frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)}{\omega} \right) \underline{\chi}(\mathbf{k})^{-1} \mathbf{v}(\mathbf{k},t=0) \,. \tag{3.51}$$

Der so gewonnene Ausdruck lässt sich weiter vereinfachen, wenn man die folgenden Beziehungen ausnutzt. Eine Laplace-Transformation von Gleichung (3.42) liefert den Zusammenhang

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},s) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)}{\omega - s}, \qquad (3.52)$$

woraus die statische Suszeptibilität mit Hilfe des Grenzübergangs

$$\underline{\chi}(\mathbf{k}) = \lim_{\epsilon \to 0} \underline{\chi}(\mathbf{k}, s = i\epsilon) = \int \frac{d\omega}{\pi} \, \underline{\chi}''(\mathbf{k}, \omega) \frac{\omega}{\omega} \,. \tag{3.53}$$

folgt. Somit lassen sich die beiden Integrale in Gleichung (3.51) als die Darstellungen (3.52) und (3.53) der dynamischen und statischen Suszeptibilität identifizieren. Vergleicht man das Resultat mit den Gleichungen (3.3) und (3.5), findet man den allgemeinen Zusammenhang

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},s) = \frac{1}{is} \left(\underline{\chi} \left(\mathbf{k}, s \right) \underline{\chi} \left(\mathbf{k} \right)^{-1} - \underline{I} \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}, t = 0)$$
$$=: \underline{R} \left(\mathbf{k}, s \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}, t = 0) .$$
(3.54)

Die Relaxationsfunktion $\underline{R}(\mathbf{k}, s)$, die die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsauslenkung ins Gleichgewicht beschreibt, lässt sich durch die dynamische Suszeptibilität also wie folgt darstellen,

$$\underline{R}(\mathbf{k},s) = \frac{1}{is} \left(\underline{\chi}(\mathbf{k},s) \underline{\chi}(\mathbf{k})^{-1} - \underline{I} \right), \qquad (3.55)$$

wobei $\underline{\chi}(\mathbf{k}, s)$ mit Hilfe von (3.52) durch das Fluktuations-Dissipations Theorem (3.44) in Bezug zur spektralen Dichte steht.

Spezialfall einer ruhenden Flüssigkeit

Im Falle einer ruhenden Flüssigkeit ist dies aber genau der Relaxationsprozess, der für kleine \mathbf{k} durch Gleichung (3.6) gegeben ist, so dass man durch Vergleich die folgende

Relation erhält

$$R(\mathbf{k},s) = \frac{1}{is} \left(\underline{\chi} \left(\mathbf{k}, s \right) \underline{\chi} \left(\mathbf{k} \right)^{-1} - 1 \right) \approx \frac{i}{s + i\nu k^2} \,. \tag{3.56}$$

Löst man diesen Ausdruck nach der Laplacetransformierten der Suszeptibilität auf, ergibt sich

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},s) = \frac{i\nu k^2}{s + i\nu k^2} \underline{\chi}(\mathbf{k}) \,. \tag{3.57}$$

Mit $s = \omega + i\epsilon$ und dem Grenzübergang $\epsilon \to 0$ (man nähert sich also im oberen Halbraum der reellen Achse) erhält man

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},\omega) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i\nu k^2}{\omega + i(\epsilon + \nu k^2)} \underline{\chi}(\mathbf{k})$$
$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{i\nu k^2 \omega + \nu k^2(\epsilon + \nu k^2)}{\omega^2 + (\epsilon + \nu k^2)^2} \underline{\chi}(\mathbf{k}).$$
(3.58)

Spaltet man die dynamische Suszeptibilität in ihren Real- und Imaginärteil auf, so findet man, dass der Imaginärteil gerade gleich der Fouriertransformierten der Response-Funktion ist [61], das heißt, es gilt

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},\omega) = \underline{\chi}'(\mathbf{k},\omega) + i\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega), \qquad (3.59)$$

wobei die beiden Funktionen $\underline{\chi}'(\mathbf{k},\omega)$ und $\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)$ über Kramers-Kronig Relationen miteinander verknüpft sind [61]. Mit der Aufspaltung der Gleichung (3.58),

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},\omega) = \frac{(\nu k^2)^2}{\omega^2 + (\nu k^2)^2} \underline{\chi}(\mathbf{k}) + i \frac{\nu k^2 \omega}{\omega^2 + (\nu k^2)^2} \underline{\chi}(\mathbf{k}), \qquad (3.60)$$

erhält man die Responsefunktion $\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)$,

$$\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega) = \operatorname{Im}\underline{\chi}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\nu k^2 \omega}{\omega^2 + (\nu k^2)^2 \underline{\chi}(\mathbf{k})}.$$
(3.61)

Ein Vergleich mit der Gleichung für die spektrale Dichte (3.21) zeigt, dass das in Gleichung (3.44) genannte Fluktuations-Dissipations Theorem für den Fall der ruhenden Flüssigkeit erfüllt ist:

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \frac{2Q^2}{\omega} \underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega) \,. \tag{3.62}$$

Oseen-Tensor

Der Oseen-Tensor $\underline{\Omega}(\mathbf{k})$ ist die stationäre Lösung der Gleichung (3.4) für inkompressible Flüssigkeiten und hat im Wellenzahlraum die Darstellung

$$\underline{\Omega}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\nu k^2} (\underline{I} - \mathbf{k}\mathbf{k}).$$
(3.63)

Ein Vergleich mit der Responsefunktion (3.61) liefert den Zusammenhang

$$\underline{\Omega}(\mathbf{k}) = \lim_{\omega \to 0} \frac{\underline{\chi}''(\mathbf{k}, \omega)}{\omega}.$$
(3.64)

3.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden in Abschnitt 3.1 die Bewegungsgleichungen für die Fluktuationen in einer makroskopisch ruhenden Flüssigkeit betrachtet und deren Korrelationsfunktionen auf zwei verschiedene Arten ermittelt. Zum einen wurde in Abschnitt 3.3.1 die Kenntnis der statischen Suszeptibilität vorrausgesetzt und zum anderen wurde im Abschnitt 3.3.2 die Korrelation des stochastischen Spannungstensors benutzt. Bei diesen Berechnungen wurden die Begriffe spektrale Dichte, Relaxationsfunktion und Suszeptibilität eingeführt und wichtige Symmetriebeziehungen abgeleitet. Zum Schluss wurde die Gültigkeit des Fluktuations-Dissipations Theorems für eine makroskopisch ruhende Flüssigkeit bestätigt.

4 Fluktuationen in inkompressibler Scherströmung

Nachdem im vorangegangenen Kapitel die thermischen Fluktuationen einer im Mittel ruhenden Flüssigkeit beschrieben wurden, soll beginnend mit diesem Kapitel der Einfluss einer deterministischen Scherströmung $\mathbf{u}_0(y) = gy\hat{e}_x$ auf die Geschwindigkeitsfluktuationen untersucht werden.

Aufgrund der Scherströmung befindet sich die Flüssigkeit fern vom (globalen) thermischen Gleichgewicht und es können daher nicht die gleichen Techniken wie im Kapitel 3 eingesetzt werden, um die statischen Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen zu berechnen. Es wird aber angenommen, dass die Flüssigkeit sich weiterhin lokal im thermischen Gleichgewicht befindet und dadurch die Fluktuationen des Spannungstensors durch die Scherströmung unverändert bleiben [54].

Das Hauptinteresse des vorliegenden Kapitels liegt in denjenigen Fluktuationsbeiträgen, die sich auch auf die Brownsche Bewegung eines in der Flüssigkeit gelösten Teilchens auswirken. Es wird sich zeigen, dass in einem Scherfluss die Kreuzkorrelation $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_y(0,0)\rangle$, neben den schon in Abschnitt 3.4 besprochenen Beiträgen für die ruhende Flüssigkeit, einen zusätzlichen Beitrag für die auf eine Testkugel wirkenden stochastischen Kräfte liefert. Daher soll diese Komponente der Korrelationsmatrix im Fokus der folgenden Betrachtungen stehen.

Im Abschnitt 4.1 werden hierzu die Bewegungsgleichungen abgeleitet und deren Änderung in Bezug auf die Gleichungen (3.1) für eine makroskopisch in Ruhe befindlichen Flüssigkeit besprochen. In den folgenden Abschnitten 4.2 - 4.8 werden die Korrelationen der transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen für den Fall einer unendlich ausgedehnten, inkompressiblen Flüssigkeit durch Approximation analytisch gelöst. Die gewählte Näherungslösung beschreibt aber bereits wesentliche Trends der Geschwindigkeitskorrelationen. Effekte, die durch den endlichen Abstand d der beiden Behälterwände induziert werden (Wandeffekte), werden bei der numerischen Berechnung der Geschwindigkeitskorrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen an zwei Raumpunkten, als Funktion von deren Abstandsvektors \mathbf{r} , der Scherrate und der Reynoldszahl für unendlich ausgedehnte Gefäße.

4.1 Bewegungsgleichungen

Die Gesamtgeschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ kann in die stationäre Scherströmung $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}) = gy\hat{e}_x$ und die Fluktuationen $\mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ zerlegt werden, wobei wiederum $\langle \mathbf{u}(\mathbf{r},t) \rangle = \mathbf{u}(\mathbf{r})$ gilt. Die entdimensionalisierten und linearisierten Gleichungen für $\mathbf{v}(\mathbf{r},t)$ ergeben sich dann nach Gleichung (2.28) wie folgt:

$$\partial_t \rho + \partial_k v_k + gy \partial_x \rho = 0,$$

$$\partial_t v_i + \underbrace{gy \partial_x v_i}_{(1)} + \underbrace{gv_y \delta_{ix}}_{(2)} = -c^2 \partial_i \rho + \nu \triangle v_i + \nu (\alpha - 1) \partial_i (\partial_k v_k) + F_i^S.$$
(4.1)

Aufgrund des konvektiven Anteils der Navier-Stokes Gleichung für die Gesamtgeschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ tauchen hier in der linearen Gleichung 4.1 für $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ die beiden mit (1) und (2) bezeichneten und von der Scherrate abhängenden Beiträge auf. Deren Ursprung soll nochmals kurz erläutert werden.

Im Euler-Bild eines ortsfesten Geschwindigkeitsfeldes kann sich die Geschwindigkeit an einem Ort \mathbf{r} zwischen den Zeitpunkten $t' = t - \Delta t$ und t aufgrund von zwei Einflüssen ändern. Zum einen wird im Zeitraum Δt ein Flüssigkeitselement von der Position $\mathbf{r}(t - \Delta t)$ an den Ort \mathbf{r} transportiert, welches von dem Flüssigkeitsvolumen, das sich zuvor am betrachteten Ort befunden hat, einen verschiedenen Impuls hat. Zum anderen wirken zum Zeitpunkt t (stochastische) Kräfte auf das Flüssigkeitsvolumen, und verursachen eine weitere Änderung der Geschwindigkeit. Der letzte Beitrag ergibt sich also aus der Differenz der aktuellen Geschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ und der Geschwindigkeit $\mathbf{u}(\mathbf{r}(t - \Delta t), t - \Delta t)$ am Ort $\mathbf{r}(t - \Delta t)$ zum Zeitpunkt $t - \Delta t$:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}(t - \Delta t), t - \Delta t) \right)$$

= $\partial_t \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \frac{d}{dt} \mathbf{r}(t) \cdot \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \partial_t \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \left(\mathbf{u}(t) \cdot \nabla \right) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) ,$ (4.2)

wobei dies die bekannte konvektive Ableitung beschreibt.

Da in einem fluktuationsfreien Scherfluss die Flüssigkeitsvolumina ihre Position in Richtung des Schergradienten (y-Richtung) nicht ändern und sich die Geschwindigkeiten aller Flüssigkeitsvolumina mit gleicher y-Position nicht unterscheiden, verschwindet der konvektive Anteil $(\mathbf{u}_0 \cdot \nabla) \mathbf{u}_0$ vollständig.

Die stochastischen Kräfte rufen hingegen zu verschiedenen Zeiten und an verschiedenen Orten unterschiedliche Fluktuationen der Geschwindigkeit hervor.

• So unterscheidet sich die Fluktuation, die sich zur Zeit $t - \Delta t$ am Ort $x' = x - u_{0;x} \Delta t = x - gy \Delta t$ befunden hat und im Zeitraum Δt an den Ort x transportiert wurde, von derjenigen Fluktuation am Ort x zum Zeitpunkt t, da die Fluktuationen, wie in Abbildung 4.1 (oben) skizziert, von unterschiedlichen stochastischen Kraftdichten erzeugt werden. Die Änderung der Geschwindigkeit ist also gerade die Differenz der beiden Fluktuationen und ist in den Gleichungen (4.1) als Beitrag (1) berücksichtigt.



- Abb. 4.1: Oben: Es tritt eine Geschwindigkeitsänderung $\Delta \mathbf{u}$ am betrachteten, grün hinterlegten Ort dadurch auf, dass das rote Flüssigkeitselement, das zum Zeitpunkt $t - \Delta t$ durch eine Fluktuation im Spannungstensor eine Abweichung von der mittleren Strömung erfahren hat, durch diese mittlere deterministische Strömung (rot gepunkteter Pfeil) an diesen grün hinterlegten Ort transportiert wird, und eine vom grünen Flüssigkeitsvolumen verschiedene *Fluktuationsgeschwindigkeit* hat. Die Änderung der Geschwindigkeit $\Delta \mathbf{u}$ im Zeitraum Δt ist also die durch den blauen Pfeil gekennzeichnete Differenz der beiden Fluktuationsgeschwindigkeiten. Gleiches gilt für die dazu senkrechten Fluktuationskomponenten. Unten: Hier ändert das rote Flüssigkeitselement durch eine Geschwindigkeitsfluktuation in y-Richtung seine y-Position. Dort herrscht eine andere deterministische Strömungsgeschwindigkeit, so dass im betrachteten grün hinterlegten Ort eine Änderung der Geschwindigkeit im Zeitraum Δt , gegeben durch die Differenz der beiden deterministischen Geschwindigkeiten auftritt. Diese Änderung ist durch den blau gepunkteten Pfeil angedeutet.
 - Wegen einer Änderung der y-Position $\Delta y = v_y \Delta t$ in Abhängigkeit von der Fluktuationsgeschwindigkeit v_y gelangt ein Flüssigkeitsvolumen aus der Flüssigkeitsschicht mit Geschwindigkeit $\mathbf{u}_0(y - \Delta y)$ an die Position y, wo im Mittel die davon verschiedene Geschwindigkeit $\mathbf{u}_0(y)$ vorherrscht. Dieses Fluidvolumen führt demnach zu einer Änderung der lokalen Geschwindigkeit und ist in dem Beitrag (2) in Gleichung (4.1) berücksichtigt und in Abbildung 4.1 (unten) dargestellt.

Der im ersten Punkt besprochene und im Beitrag (1) in der Gleichung (4.1) berücksichtigte Term ist also durch die Wirkung der stochastische Kraft an einem anderen Ort und zu einer früheren Zeit entstanden. Da die stochastischen Kräfte nach (2.16b) zu verschiedenene Zeiten an verschiedenen Orten unabhängig voneinander sind, könnte man vermuten, dass die Korrelation des Ausdrucks (1) mit der Geschwindigkeit zum aktuellen Zeitpunkt t, unabhängig von der lokalen Stärke der deterministischen Geschwindigkeit, im Ensemblemittel verschwindet.

Neben den hier hervorgehobenen Änderungen, die direkt aufgrund der stochastischen Kräfte auftreten, wechselwirken die bewegten Flüssigkeitsvolumina mit den benachbarten Teilvolumen, wodurch auch diese in unterschiedlichste Richtungen bewegt werden und zu lokalen Änderungen der Geschwindigkeit führen. Diese ergeben insbesondere im Zusammenhang mit der Inkompressibilität weitere komplizierte Kopplungen der Geschwindigkeiten verschiedener Richtungen und somit auch der hervorgehobenen Beiträge (1) und (2). Für die weitere Rechnung ist es hilfreich, die Geschwindigkeitsfluktuationen nach ihrem longitudinalen Anteil \mathbf{v}^l , mit $\nabla \times \mathbf{v}^l = 0$, und ihrem transversalen Anteil \mathbf{v}^t , mit $\nabla \cdot \mathbf{v}^t = 0$, aufzuspalten: $\mathbf{v} = \mathbf{v}^l + \mathbf{v}^t$.

Wie im Anhang A genau vorgerechnet, lauten die Gleichungen für die beiden Anteile und die Dichtefluktuationen wie folgt:

$$(\partial_t + gy\partial_x)\nabla\rho + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}^l) = 0, \qquad (4.3a)$$

$$(\partial_t - \nu \alpha \triangle + gy \partial_x) \triangle \mathbf{v}^l + c^2 \triangle \nabla \rho + 2g \partial_x \nabla (v_y^l + v_y^t) + g \partial_x (\nabla \cdot \mathbf{v}^l) \hat{\mathbf{e}}_y = \nabla H , \qquad (4.3b)$$

$$\left(\partial_t - \nu \triangle + gy \partial_x\right) \triangle \mathbf{v}^t + g \begin{pmatrix} \triangle (v_y^t + v_y^l) - 2\partial_x (\partial_x v_y^t - \partial_y v_x^t) \\ -\Delta v_x^l \\ 2\partial_x (\partial_y v_z^t - \partial_z v_y^t) \end{pmatrix} = -\mathbf{G} .$$
 (4.3c)

Hierbei gilt wieder $\mathbf{G} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{F}^S$ und $H = \nabla \cdot \mathbf{F}^S$ mit $F_i^S = \partial_k \xi_{ik}$. Die Geschwindigkeiten müssen, sofern Wände vorhanden sind, noch die Randbedingungen in (2.19) und für inkompressible Flüssigkeiten außerdem die in (2.20) genannte Bedingung erfüllen.

Diese Gleichungen für die transversalen und longitudinalen Fluktuationsanteile sind im Gegensatz zur ruhenden Flüssigkeit nun gekoppelt.

4.2 Inkompressible Flüssigkeiten

Im Falle inkompressibler Flüssigkeiten ist wegen $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ die longitudinale Geschwindigkeitskomponente \mathbf{v}^l räumlich homogen und es bleiben insgesamt die Gleichungen für die transversalen Komponenten \mathbf{v}^t zu lösen. Mit $\mathbf{v} = \mathbf{v}^t$ reduzieren sich dann die Gleichungen (4.3) zu

$$\left(\partial_t - \nu \bigtriangleup + gy \partial_x\right) \bigtriangleup v_x + 2g \partial_x \partial_y v_x + g(\partial_y^2 + \partial_z^2 - \partial_x^2) v_y = -G_x , \left(\partial_t - \nu \bigtriangleup + gy \partial_x\right) \bigtriangleup v_y = -G_y , \left(\partial_t - \nu \bigtriangleup + gy \partial_x\right) \bigtriangleup v_z - g \partial_x \partial_z v_y + g \partial_x (2\partial_y v_z - \partial_z v_y) = -G_y .$$
 (4.4)

Durch die Inkompressibilitätsbedingung $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ sind die verbleibenden drei transversalen Geschwindigkeitskomponenten gekoppelt und das System (4.4) ist überbestimmt.¹ Da aber die ersten beiden Gleichungen in (4.4) unabhängig von v_z sind, kann man zum Beispiel die letzte Gleichung in (4.4) vernachlässigen, und stattdessen v_z auch aus der Inkompressibiltätsbedingung ermitteln. Um sicherzustellen, dass beide Varianten zum selben Ergebnis führen, soll durch die folgende Konsistenzüberlegung untersucht werden, ob die Gleichungen (4.4) die Inkompressibilitätsbedingung erfüllen.

¹ Formuliert man die dynamischen Gleichungen jeweils in zwei gekoppelten Gleichungen für die Geschwindigkeiten v_i und deren Zeitableitung $\partial_t v_i$ (für $i \in \{1, 2, 3\}$), so ergeben sich zusammen mit der Inkompressibilität 7 Gleichungen für die 6 unbekannten Größen.

Konsistenzüberlegungen

Hierzu wendet man die Divergenz auf die Gleichungen (4.4) an und erhält nach wenigen Umformungen eine Gleichung für die Divergenz von \mathbf{v} :

$$\left(\left(\partial_t - \nu \triangle + gy \partial_x\right) \triangle + 2g \partial_x \partial_y\right) \nabla \cdot \mathbf{v} = -\nabla \cdot \mathbf{G} \,. \tag{4.5}$$

Nach Konstruktion gilt $\nabla \cdot \mathbf{G} = \nabla \cdot (\nabla \times \nabla \times \mathbf{F}^S) = 0$. Ist die Inkompressibilitätsbedingung $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ also zu irgendeinem Zeitpunkt erfüllt, so bleibt sie es nach Gleichung (4.5) auch.

Matrixgleichung

Man kann das gekoppelte Differentialgleichungssystem (4.3) in Form einer Matrixgleichung

$$\left(\underline{\mathcal{J}}\,\partial_t + \underline{\mathcal{M}}\,\right)\mathbf{v} = -\mathbf{G} \tag{4.6}$$

mit $\underline{\mathcal{M}} = \underline{\mathcal{M}}_0 + g\underline{\mathcal{M}}_g$ formulieren, indem man die Matrix
operatoren mit der Einheitsmatrix \underline{I} wie folgt einführt

$$\underline{\mathcal{J}} := \underline{I} \triangle,
\underline{\mathcal{M}}_0 := -\nu \underline{I} \triangle^2,
\underline{\mathcal{M}}_g := \begin{pmatrix} (y \triangle + 2\partial_y) \partial_x & (\triangle - 2\partial_x^2) & 0 \\ 0 & y \triangle \partial_x & 0 \\ 0 & -2\partial_x \partial_z & (y \triangle + 2\partial_y) \partial_x \end{pmatrix}.$$
(4.7)

Näherungslösung

Wie im Falle der ruhenden Flüssigkeit wäre es naheliegend, die Gleichungen (4.6) im Fourierraum zu lösen. Die Ausdrücke ~ $y\partial_x$ auf der Diagonalen der Matrix $\underline{\mathcal{M}}_g$ in (4.7) verhindern aber eine einfache Transformation. Da diese Beiträge alle auf der Diagonalen der Matrix zu finden sind, treten sie in der homogenen Lösung der Gleichung (4.6) auf und rufen dort eine Änderung der Zeitabhängigkeit gegenüber dem Fall einer ruhenden Flüssigkeit hervor.² Unter der Annahme, dass die Diagonalterme keinen großen Einfluss auf die statische Lösung haben, werden sie in der folgenden Rechnung vernachlässigt, $\mathcal{M}_{g;ii} = 0$. Bei der numerischen Berechnung in Kapitel 5 werden wieder sämtliche Terme berücksichtigt und es zeigt sich, dass die hier durchgeführte Näherung im betrachteten Grenzfall $r/d \ll 1$, mit dem Wandabstand d, wenig Einfluss auf die hauptsächlich analysierte statische Kreuzkorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, t = 0)v_y(0, 0) \rangle$ hat.

² Diese Beiträge treten ebenso mit dem Ansatz einer homogenen Strömung auf. Dort hat man jedoch einen mittleren Teilchenstrom, so dass die Terme nach einer Transformation ins mitbewegte System wegfallen. Im Scherfluss fließen so viele Flüssigkeitselemente in die positive, wie in die negative x-Richtung, so dass der mittlere Teilchenfluss verschwindet und das Koordinatensystem festgehalten wird.

Unter Vernachlässigung der Diagonalterme ergibt sich nach einer Fouriertransformation der Gleichung (4.6) und mit der Abkürzung $\underline{L} = \underline{A}(\mathbf{k}) + \underline{gB}(\mathbf{k})$ die Matrixgleichung

$$\left(-i\omega\underline{I} + \underline{A}(\mathbf{k}) + \underline{g}\underline{B}(\mathbf{k})\right)\mathbf{v}(\mathbf{k},\omega) =: \left(-i\omega\underline{I} + \underline{L}(\mathbf{k})\right)\mathbf{v}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\mathbf{G}(\mathbf{k},\omega)}{k^2}.$$
 (4.8)

Die hier auftretenden Matrizen $\underline{A}(\mathbf{k})$ und $\underline{B}(\mathbf{k})$ ergeben sich aus $\underline{\mathcal{J}}(\mathbf{k})$, $\underline{\mathcal{M}}_0(\mathbf{k})$ und $\underline{\mathcal{M}}_q(\mathbf{k})$ nach deren Fouriertransformation zu

$$\underline{A}(\mathbf{k}) := \underline{\mathcal{J}}^{-1}(\mathbf{k})\underline{\mathcal{M}}(\mathbf{k}) = \nu k^2 \underline{I} , \qquad (4.9)$$

und

$$\underline{B}(\mathbf{k}) = := \underline{\mathcal{J}}^{-1}(\mathbf{k})\underline{\mathcal{M}}_g(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & (1-2\hat{k}_x^2) & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & -2\hat{k}_x\hat{k}_z & 0 \end{pmatrix}.$$
(4.10)

4.3 Lösung für das Geschwindigkeitsfeld

Die allgemeine Lösung der Gleichung (4.8) im ω -k Raum ergibt sich einfach durch Multiplikation mit dem Inversen von $\left(-i\omega \underline{I} + \underline{L}(\mathbf{k})\right)$ zu

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},\omega) = \left(-i\omega\underline{I} + \underline{L}(\mathbf{k})\right)^{-1} \frac{\mathbf{G}(\mathbf{k},\omega)}{k^2} = \left(-i\omega\underline{I} + \underline{A}(\mathbf{k}) + \underline{g}\underline{B}(\mathbf{k})\right)^{-1} \frac{\mathbf{G}(\mathbf{k},\omega)}{k^2}.$$
 (4.11)

Das Inverse der Matrix $\left(-i\omega \underline{I} + \underline{L}(\mathbf{k})\right)$ lässt sich mit Hilfe einer Dyson-Zerlegung wie folgt darstellen³

$$\left(-i\omega\underline{I} + \underline{A}(\mathbf{k}) + g\underline{B}(\mathbf{k}) \right)^{-1}$$

= $\left(-i\omega\underline{I} + \underline{A}(\mathbf{k}) \right)^{-1} - g\left(-i\omega\underline{I} + \underline{A}(\mathbf{k}) \right)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k}) \left(-i\omega\underline{I} + \underline{A}(\mathbf{k}) + g\underline{B}(\mathbf{k}) \right)^{-1}$

Wendet man die gleiche Zerlegung wiederum auf die letzte Klammer an, so ergibt sich das Inverse des Operators bis zur linearen Ordnung in g mit der expliziten Darstellung der Matrix $\underline{A}(\mathbf{k}) = \nu k^2 \underline{I}$ zu

$$\left(-i\omega\underline{I}+\underline{A}(\mathbf{k})+g\underline{B}(\mathbf{k})\right)^{-1}=\left(-i\omega+\nu k^2\right)^{-1}\underline{I}-g\left(-i\omega+\nu k^2\right)^{-2}\underline{B}(\mathbf{k})+\mathcal{O}(g^2)\,.$$

Aus Gleichung (4.11) erhält man somit das Feld der Geschwindigkeitsfluktuationen bis zur linearen Ordnung in g:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},\omega) = \left(\left(-i\omega + \nu k^2 \right)^{-1} \underline{I} - g \left(-i\omega + \nu k^2 \right)^{-2} \underline{B}(\mathbf{k}) \right) \frac{\mathbf{G}(\mathbf{k},\omega)}{k^2}.$$
(4.12)

³ Diese Darstellung ist exakt, was man leicht überprüfen kann, indem man die Dyson-Zerlegung mit $(-i\omega \underline{I} + \underline{L}(\mathbf{k}))$ multipliziert und die Einheitsmatrix erhält.

Rücktransformation in der Zeit

Das Produkt zweier Funktionen im Frequenzraum führt auf Faltungsintegrale in der Zeit. Da der Ausdruck $(-i\omega + \nu k^2)^{-1}$ nach einer Rücktransformation in die Zeit mit der Heaviside-Stufenfunktionen $\Theta(t)$ die Form $\Theta(t)e^{-\nu k^2 t}$ annimmt, wie im Anhang (C.16) beschrieben, ergeben sich für die zeitabhängigen Lösungen der Geschwindigkeitsfluktuationen aus (4.12) die folgenden Faltungsintegrale

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ \Theta(t-\tau) e^{-\nu k^2 (t-\tau)} \frac{\mathbf{G}(\tau)}{k^2} - \underline{g}\underline{B}(\mathbf{k}) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ \Theta(t-\tau) e^{-\nu k^2 (t-\tau)} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau' \ \Theta(\tau-\tau') e^{-\nu k^2 (\tau-\tau')} \frac{\mathbf{G}(\tau')}{k^2}$$

Durch die Auswertung der $\Theta\mathcar{-}$ Funktionen und das Anpassen der Integrationsgrenzen erhält man

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},t) = \int_{-\infty}^{t} d\tau \ e^{-\nu k^2(t-\tau)} \frac{\mathbf{G}(\tau)}{k^2} - g\underline{B}(\mathbf{k}) \int_{-\infty}^{t} d\tau \ \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \ e^{-\nu k^2(t-\tau')} \frac{\mathbf{G}(\tau')}{k^2} \,. \tag{4.13}$$

Unter Ausnutzung der Inkompressibilität kann schließlich die Lösung für die einzelnen Komponenten wie folgt angegeben werden

$$\begin{split} v_x(\mathbf{k},t) &= \int_{-\infty}^t d\tau \ e^{-\nu k^2(t-\tau)} \frac{G_x(\mathbf{k},\tau)}{k^2} - g \int_{-\infty}^t d\tau \int_{-\infty}^\tau d\tau' \ e^{-\nu k^2(t-\tau')} (1-2\hat{k}_x^2) \frac{G_y(\mathbf{k},\tau)}{k^2} \,, \\ v_y(\mathbf{k},t) &= \int_{-\infty}^t d\tau \ e^{-\nu k^2(t-\tau)} \frac{G_y(\mathbf{k},\tau)}{k^2} \,, \\ v_z(\mathbf{k},t) &= -\frac{k_x}{k_z} v_x(\mathbf{k},t) - \frac{k_y}{k_z} v_y(\mathbf{k},t) \,. \end{split}$$

4.4 Geschwindigkeitskorrelationen bis zur linearen Ordnung in der Scherrate

Die Korrelationsmatrix der Geschwindigkeitsfluktuationen, $\langle \mathbf{v}(\mathbf{k}, t)\mathbf{v}(\mathbf{k}', t') \rangle$, lässt sich wegen Gleichung (4.13) bis zur linearen Ordnung in g wie folgt aufspalten:

$$\underline{S}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t') = \langle \mathbf{v}(\mathbf{k}, t) \mathbf{v}(\mathbf{k}', t') \rangle =: \underline{S}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t') + g\underline{S}_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t') + \mathcal{O}(g^2).$$
(4.14)

Hierin ist der Summand $\underline{S}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t')$ die Korrelationsmatrix für eine ruhende Flüssigkeit (g = 0) mit der folgenden Integraldarstellung:

$$\underline{S}_{0}(\mathbf{k},\mathbf{k}',t,t') = \int_{-\infty}^{t} d\tau \int_{-\infty}^{t'} d\tau' \ e^{-\nu k^{2}(t+t'-\tau-\tau')} \frac{\langle \mathbf{G}(\mathbf{k},\tau)\mathbf{G}(\mathbf{k}',\tau')\rangle}{k^{2}k'^{2}}.$$
(4.15)

Mit Hilfe der Korrelationsmatrix für \mathbf{G} aus Anhang D.8 können die Integrale explizit berechnet werden:

$$\underline{S}_{0}(\mathbf{k},\mathbf{k}',t-t') = (2\pi)^{3} 2Q^{2} \int_{-\infty}^{\min(t,t')} d\tau \ e^{-\nu k^{2}(t+t'-2\tau)} \nu k^{2} (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$$
$$= (2\pi)^{3} Q^{2} e^{-\nu k^{2}(t+t'-\min(t,t'))} (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$$
$$= (2\pi)^{3} Q^{2} e^{-\nu k^{2}|t-t'|} (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}').$$
(4.16)

Im statischen Fall, t = t', stimmt das Ergebnis mit der schon im vorangegangenen Kapitel bestimmten Lösung (3.33) überein:

$$\underline{S}_{0}(\mathbf{k},\mathbf{k}',0) = (2\pi)^{3}Q^{2}(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}').$$
(4.17)

Für den in g linearen Anteil ergibt sich die folgende Integraldarstellung des Summanden <u> $S_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}', t, t')$ </u> aus Gleichung (4.14),

$$\underline{S}_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}',t,t') = -\int_{-\infty}^{t} d\tau \int_{-\infty}^{t'} d\tau' \int_{-\infty}^{\tau'} d\tau'' \, e^{-\nu k^{2}(t+t'-\tau-\tau'')} \frac{\langle \mathbf{G}(\mathbf{k},\tau)\mathbf{G}(\mathbf{k}',\tau'')\rangle}{k^{2}k'^{2}} \underline{B}^{T} \\ -\int_{-\infty}^{t'} d\tau \int_{-\infty}^{t} d\tau' \int_{-\infty}^{\tau'} d\tau'' \, e^{-\nu k^{2}(t+t'-\tau-\tau'')} \underline{B} \, \frac{\langle \mathbf{G}(\mathbf{k},\tau'')\mathbf{G}(\mathbf{k}',\tau)\rangle}{k^{2}k'^{2}}, \quad (4.18)$$

wobei mit der $\delta(t - t')$ -abhängigen Korrelationsmatrix für $\langle \mathbf{G}(t)\mathbf{G}(t')\rangle$ aus Anhang D.8 die Integration über die äußeren Integrale unmittelbar durchgeführt werden kann, so dass nur noch

$$\begin{split} \underline{S}_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}',t,t') &= -(2\pi)^{3} 2Q^{2} \nu k^{2} \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \\ & \left(\int_{-\infty}^{t'} d\tau' \int_{-\infty}^{\min(t,\tau')} d\tau'' \ e^{-\nu k^{2}(t+t'-2\tau'')} (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) \underline{B}^{T}(\mathbf{k}') \\ & + \int_{-\infty}^{t} d\tau' \int_{-\infty}^{\min(t',\tau')} d\tau'' \ e^{-\nu k^{2}(t+t'-2\tau'')} \underline{B}(\mathbf{k}) (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) \right) \end{split}$$

zu berechnen bleibt. Je nach Vorzeichen von $\bar{t}=t-t'$ erhält man den Beitrag

$$\underline{S}_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\bar{t}) = -(2\pi)^{3} \frac{Q^{2}}{2\nu k^{2}} \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') e^{-\nu k^{2}|\bar{t}|} \qquad (4.19)$$

$$\left(\left(1+2\nu k^{2}\bar{t}\,\Theta(\bar{t})\right)\underline{B}\left(\mathbf{k}\right)\left(\underline{I}-\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right) + \left(1+2\nu k^{2}\bar{t}\,\Theta(-\bar{t})\right)\left(\underline{I}-\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right)\underline{B}^{T}(\mathbf{k}')\right).$$

Die besondere Struktur der hier auftretenden Zeitabhängigkeit wird auf Seite 60 diskutiert. Im statischen Grenzfall $\bar{t} = 0$ ergibt sich

$$\underline{S}_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\bar{t}=0) = -(2\pi)^{3} \frac{Q^{2}}{2\nu k^{2}} \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \left(\underline{B}(\mathbf{k})(\underline{I}-\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) + (\underline{I}-\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\underline{B}^{T}(-\mathbf{k})\right),$$

mit den beiden Matrizen

$$\underline{B}(\mathbf{k})(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} -(1 - 2\hat{k}_x^2)\hat{k}_x\hat{k}_y & (1 - 2\hat{k}_x^2)(1 - \hat{k}_y^2) & -(1 - 2\hat{k}_x^2)\hat{k}_z\hat{k}_y \\ 0 & 0 & 0 \\ 2\hat{k}_x^2\hat{k}_z\hat{k}_y & -2\hat{k}_x^2\hat{k}_z(1 - \hat{k}_y^2) & 2\hat{k}_x\hat{k}_z^2\hat{k}_y \end{pmatrix},$$

$$(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\underline{B}^T(-\mathbf{k}) = \left(\underline{B}(\mathbf{k})(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\right)^T.$$

$$(4.20)$$

Wie im Vorspann dieses Kapitels bereits beschrieben, liegt das wesentliche Interesse an denjenigen Geschwindigkeitskorrelationen, die Kräfte auf eine symmetrische Kugel erzeugen können, sich also bei der Integration über alle Richtungen *nicht* wegheben und somit symmetrisch in **r** sind. Da ungerade **k** in den Ausdrücken auch ungerade Ortsabhängigkeiten ergeben,⁴ soll im Folgenden der einzige Ausdruck betrachtet werden, der einer solchen Ortsintegration standhält, nämlich $S_{1;xy}(0, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = S_{1;yx}(0, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$:

$$S_{1;xy}(0,\mathbf{k},\mathbf{k}') = -(2\pi)^3 \frac{Q^2}{2\nu k^2} \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')(1-2\hat{k}_x^2)(1-\hat{k}_y^2).$$
(4.22)

Die Rücktransformation in den Ortsraum ist dann formal durch das Fourierintegral

$$S_{1;xy}(0,\mathbf{r}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2) = -g\frac{Q^2}{2\nu}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{1}{k^2}(1-2\hat{k}_x^2)(1-\hat{k}_y^2)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$
(4.23)

gegeben.

Zur Ausführung des Integrals benutzt man günstigerweise Kugelkoordinaten, womit der Vektor $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ die Darstellung $\mathbf{r} = r(\sin \Theta \cos \Phi, \sin \Theta \sin \Phi, \cos \Theta)$ hat. Wie in Abbildung 4.2 links skizziert, wird durch eine Rotation zunächst um die z-Achse mit dem Winkel $-\Phi$ (Weg (1)) und dann um die y-Achse mit dem Winkel $-\Theta$ (Weg (2)) das Koordinatensystem derart gedreht, dass der Ortsvektor im neuen System, wie im rechten Teil der Abbildung 4.2 dargestellt, die Komponente $\mathbf{r}' = (0, 0, r)$ hat. Die Drehungen werden durch die Drehmatrizen

$$\underline{D} \Phi = \begin{pmatrix} \cos \Phi & \sin \Phi & 0 \\ -\sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \underline{D} \Theta = \begin{pmatrix} \cos \Theta & 0 & -\sin \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \Theta & 0 & \cos \Theta \end{pmatrix}$$
(4.24)

erzeugt und es gilt $\mathbf{r}' = \underline{D}_{\Theta} \underline{D}_{\Phi} \mathbf{r}.$

$$f(-r) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(-k) e^{-ikr} \,. \tag{4.21}$$

Für im Fourierraum symmetrische Funktionen $f_s(k) = f_s(-k)$ ist dann auch $f_s(r) = f_s(-r)$ symmetrisch, wohingegen für antisymmetrische Funktionen $f_a(k) = -f_a(-k)$ auch die Ortsabhängigkeit $f_a(r) = -f_a(-r)$ antisymmetrisch ist. Im letzten Fall verschwindet demnach das Integral $\int_{-r_0}^{r_0} f_a(r) = 0$.

⁴ Für eine Funktion $f(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} f(k) e^{-ikr}$, deren Fouriertransformierte f(k) ist, gilt nach einer Substitution $k \to -k$ die Beziehung



Abb. 4.2: Die linke Skizze zeigt die ursprüngliche Lage des Koordinatensystems. Rechts ist die Lage nach der Rotation des Koordinatensystems dargestellt. Die blauen Pfeile in der xy- Ebene der linken Abbildung stellen das deterministische Scherfeld dar.

Wenn also der Vektor \mathbf{k} im gedrehten System, wie im rechten Teil der Abbildung 4.2 gezeigt, die Komponenten $\mathbf{k}' = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$ hat, ergibt sich nach einer Rücktransformation in das Ursprungssystem der Wellenzahlvektor $\mathbf{k} = \underline{D} \Phi D \Theta \mathbf{k}'$. Für das Argument der Exponentialfunktion in Gleichung (4.23) gilt in beiden Fällen $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \vartheta$. Die kartesischen Komponenten von \mathbf{k} im Ursprungssystem lassen sich somit durch die Winkel Θ und Φ , welche die Richtung von \mathbf{r} im Ursprungssystem beschreiben, und die Winkel ϑ und φ , die die Orientierung von \mathbf{k} relativ zu \mathbf{r} angeben, ausdrücken:

$$\mathbf{k} = k \begin{pmatrix} \cos\Theta\cos\Phi\sin\vartheta\cos\varphi - \sin\Phi\sin\vartheta\sin\varphi + \sin\Theta\cos\Phi\cos\vartheta\\ \cos\Theta\sin\Phi\sin\vartheta\cos\varphi + \cos\Phi\sin\vartheta\sin\varphi + \sin\Theta\sin\Phi\cos\vartheta\\ -\sin\Theta\sin\vartheta\cos\varphi + \cos\Theta\cos\vartheta \end{pmatrix}.$$
(4.25)

Setzt man diese Komponenten von \mathbf{k} in die Gleichung (4.23) ein, so lässt sich das Integral

$$S_{1;xy}(0,\mathbf{r}=\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2}) = -g\frac{Q^{2}}{2\nu}\int_{0}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\int_{0}^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}\int_{0}^{\pi}\frac{d\vartheta}{2\pi}\sin\vartheta(\hat{k}_{y}^{2}+\hat{k}_{z}^{2}-\hat{k}_{x}^{2})(1-\hat{k}_{y}^{2})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{z}}$$

ausführen und man erhält die Kreuzkorrelation in Abhängigkeit vom Abstand $r = |\mathbf{r}|$ und seiner Orientierung $\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r}$:

$$\langle v_x(0,\mathbf{r})v_y(0,0)\rangle = -g\frac{Q^2}{32\pi\nu}\frac{1}{r}\left(2+3\sin^4\Theta\cos^2\Phi\sin^2\Phi - 2\sin^2\Theta\sin^2\Phi\right) = -g\frac{Q^2}{16\pi\nu}\frac{1}{r}\left(1-\hat{r}_y^2+\frac{3}{2}(\hat{r}_x^2\hat{r}_y^2-\hat{r}_z^2)\right).$$
(4.26)

4.5 Parameterabhängigkeit der Kreuzkorrelation

Uberlegungen im Rahmen der Approximation aus dem vorangegangenen Abschnitt dienen dazu, eine qualitative Einsicht über das Verhalten der Geschwindigkeitskorrelation $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_y(0,0)\rangle$ zu gewinnen. Durch eine Geschwindigkeitsfluktuation $v_y > 0$ wird in der Scherströmung ein kleines Flüssigkeitsvolumen mit der Koordinate (0,0,0) in positive y-Richtung befördert. Dort hat das Fluid aber eine endliche deterministische Geschwindigkeit in x-Richtung. Das in die y-Richtung beförderte Fluidelement hinkt der dortigen Grundströmung hinterher, was einer kleinen negativen Geschwindigkeitsfluktuation $v_x < 0$ in Bezug auf die Geschwindigkeit der Scherströmung gleichkommt. Dies deutet ein negatives Vorzeichen von $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_y(0,0)\rangle < 0$ in Abbildung 4.3 (durchgezogene Linie) an. Die gleiche Überlegung gilt für eine Geschwindigkeitsfluktuation $(-v_y)$, die zu einer positiven Fluktuation v_x und damit ebenfalls zu einer negativen Korrelation $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_y(0,0)\rangle < 0$ führt.

Mit Hilfe der Ausgangsgleichung (4.1) kann dies noch etwas näher illustriert werden. Betrachtet man ausschließlich den Beitrag (2) in Gleichung (4.1) und vernachlässigt den Einfluss des Druckgradienten und denjenigen der longitudinalen Fluktuationen, so lässt sich die Gleichung für die Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung in vereinfachter Form auch wie folgt darstellen:

$$\partial_t v_x - \nu \triangle v_x = F_x^S - g v_y \,. \tag{4.27}$$

Für positive Werte von v_y wird die effektive Kraft in x-Richtung dadurch um den scherratenabhängigen Beitrag gv_y reduziert.

Multipliziert man an die Gleichung (4.27) die Fluktuation von $v_y(0,0)$ zum Zeitpunkt t = 0 am Ort $\mathbf{r} = 0$ und mittelt über die stochastischen Beiträge, so ergibt sich eine Differentialgleichung für die Kreuzkorrelation $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_y(0,0)\rangle$,

$$\partial_t \langle v_x(\mathbf{r}, t) v_y(0, 0) \rangle - \nu \triangle \langle v_x(\mathbf{r}, t) v_y(0, 0) \rangle = \underbrace{\langle F_i^S v_y(0) \rangle}_{=0} -g \langle v_y(\mathbf{r}, t) v_y(0, 0) \rangle, \qquad (4.28)$$

welche im Wellenzahlraum durch

$$\langle v_x(\mathbf{k},t)v_y(\mathbf{k}',0)\rangle = -g \int_{-\infty}^t d\tau \, e^{-\nu k^2(t-\tau)} \langle v_y(\mathbf{k},\tau)v_y(\mathbf{k}',0)\rangle \tag{4.29}$$

gelöst wird. Da die von der Scherströmung unbeeinflusste Korrelation $\langle v_y(\mathbf{k}, \tau)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle$ nach (4.16) positiv ist, bestätigt sich auf diesem Weg, dass $\langle v_x(\mathbf{k}, t)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle < 0$ gilt.

In dieser vereinfachten Darstellung wurden jedoch nicht die durch den Druckgradienten entstandenen Bewegungen berücksichtigt, die schließlich zur Abhängigkeit der Fluktuationen von \mathbf{r} führen, wie sie in den Abbildungen 4.3 - 4.6 für verschiedene Richtungen dargestellt sind.

Die durchgezogene Kurve in Abbildung 4.3 zeigt die Abhängigkeit der Kreuzkorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, 0)v_y(0, 0)\rangle$ vom azimutalen Winkel Φ , der die Orientierung von \mathbf{r} relativ zur *x*-Achse beschreibt, wobei sich der Vektor \mathbf{r} innerhalb der Scherebene befindet ($\Theta = \pi/2$).



Abb. 4.3: Die Geschwindigkeitskorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, t = 0)v_y(\mathbf{r} = 0, t = 0)\rangle$ (durchgezogene Linie) ist als Funktion des Winkels Φ für konstantes r = 1.0 und $\Theta = \pi/2$ geplottet. Diese Korrelationsfunktion setzt sich aus den beiden Beiträgen "a" (gestrichelte Linie) und "b" (gestrichpunktete Linie) aus Gleichung (4.33) zusammen, die sich gerade bei $\Phi = \pm \pi/2$ wegheben.

Es ist zu erkennen, dass die Geschwindigkeitsfluktuation in Strömungsrichtung $v_x(r\hat{e}_y)$ mit derjenigen in Richtung des Schergradienten $v_y(\mathbf{r} = 0)$, falls die beiden Punkte im Abstand r = 1 genau senkrecht übereinander liegen ($\Phi = \pm \frac{\pi}{2}$), gar nicht korrelieren, $\langle v_x(\hat{e}_y, 0)v_y(0, 0) \rangle = 0$. Nach der Abschätzung (4.29) und der vorangegangenen Diskussion würde man hierfür jedoch einen endlichen Wert erwarten.

Zum Verständnis der Richtungsabhängigkeit müssen die Einflüsse aus der Inkompressibilität mit berücksichtigt werden, wozu man die Gleichungen (4.4) heranziehen muss. Vernachlässigt man in Gleichung (4.4) die homogenen Beiträge bis auf den $\nu \Delta^2 v_x$ -Term, so erhält man für die v_x -Komponente nach einer Fouriertransformation die inhomogene Bewegungsgleichung

$$\left(\partial_t + \nu k^2\right) v_x = -g(\hat{k}_y^2 + \hat{k}_z^2) v_y + g\hat{k}_x^2 v_y - \frac{G_x}{k^2}, \qquad (4.30)$$

mit den Komponenten \hat{k}_x , \hat{k}_y und \hat{k}_z des Einheitsvektors $\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k}$ in Richtung des Wellenzahlvektors. Der erste Beitrag auf der rechten Seite ist hierbei aus dem mit "(2)" bezeichneten Summanden in der Ausgangsgleichung (4.1) für die Komponente i = x hervorgegangen. Es handelt sich um den zu Beginn dieses Abschnitts diskutierten Beitrag. Der zweite Term auf der rechten Seite hat seinen Ursprung in dem mit "(1)" bezeichneten Summanden in der Ausgangsgleichung (4.1) für die Geschwindigkeitskomponente i = y.

Löst man die Gleichung (4.30) wieder formal in der Zeit, multipliziert $v_y(\mathbf{k}', t = 0)$ von rechts und mittelt, so erhält man für die Kreuzkorrelation den Ausdruck



Abb. 4.4: Die Geschwindigkeitskorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, t=0) v_y(\mathbf{r}=0, t=0) \rangle$ (durchgezogene Linie) ist als Funktion des Winkels Θ für konstantes r = 1.0 und $\Phi = 0$ geplottet. Diese Korrelationsfunktion setzt sich aus den beiden Beiträgen "a" (gestrichelte Linie) und "b" (gestrichpunktete Linie) aus Gleichung (4.33) zusammen.

$$\langle v_x(\mathbf{k}, t=0)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle = -g \int_{-\infty}^t d\tau \, e^{-\nu k^2(t-\tau)} (\hat{k}_y^2 + \hat{k}_z^2) \langle v_y(\mathbf{k}, \tau)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle$$
(4.31a)

$$+g\int_{-\infty}^{t} d\tau \, e^{-\nu k^2(t-\tau)} \hat{k}_x^2 \langle v_y(\mathbf{k},\tau) v_y(\mathbf{k}',0) \rangle \,. \tag{4.31b}$$

Die beiden Integrale sollen nun getrennt besprochen werden, so dass der Beitrag (4.31a) in einer Funktion $\langle v_x(\mathbf{k}, t = 0)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle_a$ und der Beitrag (4.31b) in einer Funktion $\langle v_x(\mathbf{k}, t)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle_b$ zusammengefasst wird und folgende Zerlegung gilt

$$\langle v_x(\mathbf{k}, t=0)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle = \langle v_x(\mathbf{k}, t=0)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle_a + \langle v_x(\mathbf{k}, t)v_y(\mathbf{k}', 0)\rangle_b.$$
(4.32)

Somit ist der Beitrag (a) aus dem mit (2) und der Beitrag (b) aus dem mit (1) bezeichneten Summanden in der Ausgangsgleichung (4.1) entstanden. Die statischen Lösungen hiervon haben nach einer Rücktransformation in den Ortsraum die folgenden richtungsabhängigen Darstellungen:

$$\langle v_x(\mathbf{r}, t=0)v_y(0,0)\rangle_a = -\frac{1}{64\pi r} \left(4 - 3\hat{r}_z^2 + 3\hat{r}_x^2\hat{r}_y^2\right),$$
(4.33a)

$$\langle v_x(\mathbf{r}, t=0)v_y(0,0)\rangle_b = \frac{1}{64\pi r} \left(3 + \hat{r}_y^2 - 3\hat{r}_x^2 - 3\hat{r}_x^2\hat{r}_y^2\right).$$
 (4.33b)

Die Summe ergibt nach ein paar Umformungen die bereits genannte Lösung (4.26). Die Richtungsabhängigkeit der einzelnen Beiträge ist in den Abbildung 4.3 und 4.4 dargestellt.



Abb. 4.5: Die Geschwindigkeitskorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, t = 0) v_y(\mathbf{r} = 0, t = 0) \rangle$ aus der Gleichung (4.26) ist als Funktion des Winkels Φ für konstante Vektorlänge $r = |\mathbf{r}| = 1.0$ und für verschiedene Winkel Θ gezeigt - siehe auch Abbildung 4.7.



Abb. 4.6: Die Geschwindigkeitskorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, t = 0) v_y(\mathbf{r} = 0, t = 0) \rangle$ aus der Gleichung (4.26) ist als Funktion des Winkels Θ für konstante Vektorlänge $r = |\mathbf{r}| = 1.0$ und für verschiedene Winkel Φ gezeigt - siehe auch Abbildung 4.7.

Untersucht man hier zunächst wiederum die Winkelabhängigkeit des Ausdrucks (4.33) in der dargestellten Scherebene $\Theta = \frac{\pi}{2}$,

$$\left\langle v_x \left(r, \Theta = \frac{\pi}{2}, \Phi, t = 0 \right) v_y(0, 0) \right\rangle_a = \frac{1}{64\pi r} \left(-4 - 3\sin(\Phi)^2 + 3\sin(\Phi)^4 \right),$$
$$\left\langle v_x \left(r, \Theta = \frac{\pi}{2}, \Phi, t = 0 \right) v_y(0, 0) \right\rangle_b = \frac{1}{64\pi r} \left(3 + 3\sin(\Phi)^4 - 2\sin(\Phi)^2 \right),$$

so erkennt man, dass der in Abbildung 4.3 gestrichelt dargestellte Beitrag "a", wie schon vermutet, immer negativ ist. Sein Wert ist an den Stellen $\Phi = \pm \frac{\pi}{2}$ minimal, und sein Verlauf ist π -periodisch. Der Beitrag "b" ist hingegen immer positiv und für $\Phi = 0$, also für $\hat{\mathbf{r}} = \hat{e}_x$, verschwindet er. Sein Maximum liegt bei $\Phi = \pm \frac{\pi}{2}$, also bei $\hat{\mathbf{r}} = \hat{e}_y$. Sein Verlauf ist 2π -periodisch. Da $|\langle v_x(\Phi, t)v_y(0, 0)\rangle_a| > \langle v_x(\Phi, t)v_y(0, 0)\rangle_b$ gilt, ist die Summe der beiden immer negativ und für $\hat{\mathbf{r}} = \hat{e}_y$ gilt $\langle v_x(\Phi = 0, t)v_y(0, 0)\rangle = 0$.

Innerhalb der senkrecht hierzu liegenden und in Abbildung 4.4 dargestellten xz-Ebene $(\Phi = 0)$ zeigt sich bezüglich der Vorzeichen ein ähnliches Bild:

$$\langle v_x(r,\Theta,\Phi=0)v_y(0,0)\rangle_a = \frac{1}{64\pi r} \left(-1 - 3\sin(\Theta)^2\right), \\ \langle v_x(r,\Theta,\Phi=0)v_y(0,0)\rangle_b = \frac{1}{64\pi r} \left(3 - 3\sin(\Theta)^2\right) = \frac{1}{16\pi r} + \langle v_x(r,\Theta,\Phi=0)v_y(0,0)\rangle_a$$

Die beiden Funktionen haben dieselbe Φ -Abhängigkeit. Auch hier ist der Beitrag "a" immer negativ und der Beitrag "b" immer positiv. Jedoch hat die Summe der beiden eine Nullstelle, wobei für $\Theta = \frac{\pi}{2}$ also $\mathbf{r} \sim \hat{e}_x$ die Korrelation negativ und für $\Theta = 0$ also $\mathbf{r} \sim \hat{e}_z$ die Korrelation positiv wird. Die Funktionen sind beide 2π -periodisch.



Abb. 4.7: Die Geschwindigkeitskorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}, t=0) v_y(\mathbf{r}=0, t=0) \rangle$ aus Gleichung (4.26) ist als Funktion der Orientierung von \mathbf{r} , also als Funktion der Winkel Θ und Φ geplottet.

Die Winkelabhängigkeiten der vollen Lösung (4.31), sind in Abbildung 4.7 in Form eines Contourplots als Funktion der beiden Winkel Θ und Φ dargestellt. Einige horizontale Querschnitte hiervon finden sich für verschiedene konstante Θ in der Abbildung 4.5. Die vertikalen Querschnitte für verschiedene Werte von Φ sind in der Abbildung 4.6 dargestellt.



Abb. 4.8: Die Zeitabhängigkeit der verschiedenen Korrelationsbeiträge ist gezeigt. Die Zeiteinheit ist gleich der hydrodynamischen Relaxationszeit νk^2 und die Korrelationen wurden für t = 0 auf 1 normiert. Zum besseren Vergleich wurde von der Kreuzkorrelation der Betrag geplottet, es gilt nach Gleichung (4.19): $\langle v_x(t)v_y(0)\rangle = -|\langle v_x(t)v_y(0)\rangle|$

Zeitabhängigkeit

Während die Korrelation in einer ruhenden Flüssigkeit, wie in Abbildung 4.8 zu erkennen ist, symmetrisch bezüglich Zeitspiegelungen ist, hat man für die linear von der Scherrate abhängende Kreuzkorrelation $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_y(0,0)\rangle$, wie in der selben Abbildung gezeigt, ein unsymmetrisches Zeitverhalten. Die Ursache hierfür liegt, wie in [43] beschrieben wird, darin begründet, dass als Quelle der Fluktuationen für die Kreuzkorrelation nicht etwa eine δ -korrelierte Kraft auftritt, sondern stattdessen v_y , dessen Korrelation wie $e^{-k^2|t|}$ abfällt. Die Kreuzkorrelation hat ihr Maximum nicht für t = 0, sondern bei $t = \frac{1}{2\nu k^2}$ und hat dort den Wert $\frac{2}{\nu k^2 e^2}$. Die Höhe des Maximums wächst also mit der Reynoldszahl ν^{-1} , was nach [42] ein möglicher Grund für den Übergang zur Turbulenz ist. Insbesondere bedeutet dies, dass die später ausführlich besprochene statische Kreuzkorrelation nicht den höchsten Wert darstellt, sondern der Maximalwert für endliche Zeiten erreicht wird und umgekehrt proportional zu ν wächst. Wie in der selben Abbildung 4.8 zu erkennen, ist die in der Scherrate quadratische Korrektur zur Autokorrelation $\langle v_x(\mathbf{r},t)v_x(0,0) \rangle$ symmetrisch in der Zeit.

4.6 Geschwindigkeitskorrelation in beliebiger Ordnung der Scherrate

Bei Vernachlässigung der Wandeffekte können neben der Kreuzkorrelation $\langle v_x(t, \mathbf{r})v_y(0, 0)\rangle$ auch die restlichen Korrelationen der Korrelationsmatrix <u>S</u>(\mathbf{k}, ω) insbesondere auch für höhere Ordnungen in g berechnet werden. Die Korrelationen werden vorwiegend im Fourierraum berechnet und die Herleitung orientiert sich hierbei an derjenigen für die ruhenden Flüssigkeit.

Betrachtet man wieder die Ausgangsgleichung (4.8) und führt jetzt neben einer Fouriertransformation im Ortsraum eine Laplace-Transformation in der Zeit durch und mittelt anschließend über den stochastischen Spannungstensor, so erhält man eine Gleichung, die mit der Relaxationsfunktion $\underline{R}_g(\mathbf{k}, s)$ die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsauslenkung ins Gleichgewicht beschreibt:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k},s) = \left(-is + \underline{L}(\mathbf{k})\right)^{-1} \mathbf{v}(\mathbf{k},t=0) =: \underline{R}_g(\mathbf{k},s) \mathbf{v}(\mathbf{k},t=0).$$
(4.34)

Man kann an diesen Ausdruck von rechts dyadisch den Geschwindigkeitsvektor zum Zeitpunkt t = 0 multiplizieren und den Erwartungswert bilden. Die daraus resultierende Gleichung setzt die Laplace-Transformierte der dynamischen Korrelation mit der statischen in Beziehung:

$$\underline{\tilde{S}}(\mathbf{k},s) = \underline{R}_{q}(\mathbf{k},s)\underline{S}(\mathbf{k},t=0).$$
(4.35)

Eine Rücktransformation in die Zeit liefert dann, wie im Anhang C.3 gezeigt, die Lösung

$$\underline{S}(\mathbf{k},t) = e^{-\underline{L}t}\underline{S}(\mathbf{k},t=0) =: \underline{R}_g(\mathbf{k},t)\underline{S}(\mathbf{k},t=0)$$
(4.36)

und die spektrale Dichte ergibt sich mit Hilfe von

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \underline{R}_g(\mathbf{k},s=\omega)\underline{S}(\mathbf{k},t=0) + \left(\underline{R}_g(\mathbf{k},s=\omega)\underline{S}(\mathbf{k},t=0)\right)^{\dagger}.$$
(4.37)

Wie oben schon erwähnt und anhand der S_{xy} -Komponente im vorherigen Abschnitt gezeigt, ist die statische Korrelation von der Scherrate abhängig, und kann, wie in (4.11) geschehen, nur unter der Voraussetzung des lokalen Gleichgewichts berechnet werden.

Mit $\underline{L} = \nu k^2 \underline{I} + \underline{gB}$ kann man in (4.11) die Entwicklung bis zur beliebigen Ordnung in g^l durchführen und erhält allgemein

$$\underline{R}_{g}(\mathbf{k}, s = \omega) = \left((-i\omega + \nu k^{2})\underline{I} + g\underline{B}(\mathbf{k}) \right)^{-1}$$
$$= \sum_{q=0}^{l} (-g)^{\nu} \left[\left(-i\omega + \nu k^{2} \right)^{-1} \underline{B}(\mathbf{k}) \right]^{q} \left(-i\omega + \nu k^{2} \right)^{-1}.$$
(4.38)

Die genäherte Darstellung der Matrix <u>B</u> in (4.10) hat aber gerade die Eigenschaft <u>B</u>² = 0 und man erhält aus Gleichung (4.38) für l > 2

$$\underline{R}_{g}(\mathbf{k}, s=\omega) = \left(\underline{I} - g\left(-i\omega + \nu k^{2}\right)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k})\right)\left(-i\omega + \nu k^{2}\right)^{-1}.$$
(4.39)

Mit der bekannten Korrelation für eine ruhende Flüssigkeit aus Gleichung (3.32),

$$\underline{S}_{0}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega,\omega') = 2Q^{2}(2\pi)^{4} \frac{\nu k^{2}}{\omega^{2}+\nu^{2}k^{4}} (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\delta(\omega+\omega')$$
$$=: (2\pi)^{4} \underline{S}_{0}(\mathbf{k},\omega)\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\delta(\omega+\omega'), \qquad (4.40)$$

ergibt sich also die spektrale Dichte im Scherfluss:

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \left(\underline{I} - g\left(-i\omega + \nu k^2\right)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k})\right)\underline{S}_0(\mathbf{k},\omega)\left(\underline{I} - g\left(i\omega + \nu k^2\right)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k})^{\dagger}\right).$$

Der besseren Übersichtlichkeit wegen werden die Beiträge der verschiedenen Ordnungen in g zusammengefasst, so dass man insgesamt die folgende Darstellung erhält

$$\underline{S}(\mathbf{k},\omega) = \underline{S}_{0}(\mathbf{k},\omega) + g\underline{S}_{1}(\mathbf{k},\omega) + g^{2}\underline{S}_{2}(\mathbf{k},\omega).$$
(4.41)

Hierbei sind die einzelnen Summanden wie folgt definiert, wobei sie in zwei zueinander adjungierte Matrizen aufgespalten wurden, und der Index h für "halb" steht:

$$\underline{S}_{0}(\mathbf{k},\omega) = 2Q^{2} \frac{\nu k^{2}}{\omega^{2} + \nu^{2} k^{4}} \left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}} \right),$$

$$\underline{S}_{1}(\mathbf{k},\omega) = -\left(-i\omega + \nu k^{2} \right)^{-1} \underline{B}(\mathbf{k}) \underline{S}_{0}(\mathbf{k},\omega) - \left(i\omega + \nu k^{2} \right)^{-1} \underline{S}_{0}(\mathbf{k},\omega) \underline{B}(\mathbf{k})^{\dagger}$$

$$=: \underline{S}_{1}^{h}(\mathbf{k},\omega) + \left(\underline{S}_{1}^{h}(\mathbf{k},\omega) \right)^{\dagger},$$
(4.42)
(4.43)

$$\underline{S}_{2}(\mathbf{k},\omega) = \left(\omega^{2} + \nu^{2}k^{4}\right)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k})\underline{S}_{0}(\mathbf{k},\omega)\underline{B}(\mathbf{k})^{\dagger} = \frac{1}{2}\underline{S}_{2}(\mathbf{k},\omega) + \frac{1}{2}\underline{S}_{2}(\mathbf{k},\omega)^{\dagger}$$
$$=: \underline{S}_{2}^{h}(\mathbf{k},\omega) + \left(\underline{S}_{2}^{h}(\mathbf{k},\omega)\right)^{\dagger}.$$
(4.44)

4.6.1 Rücktransformation in die Zeit

Für die ruhende Flüssigkeit wurde bereits in Gleichung (3.22) zusammen mit der statischen Suszeptibilität aus (3.34) die folgende zeitabhängige Lösung gefunden:

$$\underline{S}_{0}(\mathbf{k},t) = Q^{2} e^{-\nu k^{2}|t|} \left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}} \right).$$
(4.45)

Für den linearen Beitrag in der Scherrate ergibt sich nach Partialbruchzerlegung⁵ des Ausdruckes für <u>S</u>₀ aus (4.42) die Darstellung

$$\underline{S}_{1}^{h}(\mathbf{k},\omega) = -Q^{2}\left(-i\omega+\nu k^{2}\right)^{-1}\left(\left(-i\omega+\nu k^{2}\right)^{-1}+\left(i\omega+\nu k^{2}\right)^{-1}\right)\underline{B}\left(\mathbf{k}\right)\left(\underline{I}-\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right),$$

 5 Es gilt

$$(\omega^{2} + \nu^{2}k^{4})^{-1} = \frac{1}{2\nu k^{2}} \left((-i\omega + \nu k^{2})^{-1} + (i\omega + \nu k^{2})^{-1} \right)$$
(4.46)
was nach einer Rücktransformation in die Zeit den im Abschnitt zuvor bereits auf andere Art hergeleiteten Ausdruck

$$\underline{S}_{1}^{h}(\mathbf{k},t) = -Q^{2}\underline{B}(\mathbf{k})\left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \,\Theta(t-\tau)e^{-\nu k^{2}(t-\tau)} \left(\Theta(\tau)e^{-\nu k^{2}\tau} + \Theta(-\tau)e^{\nu k^{2}\tau}\right)$$
$$= -\frac{Q^{2}}{2\nu k^{2}}\underline{B}(\mathbf{k})\left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right) \left(\Theta(t)e^{-\nu k^{2}t}\left(1 + 2\nu k^{2}t\right) + \Theta(-t)e^{\nu k^{2}t}\right)$$
(4.47)

ergibt. Die statische Lösung $\underline{S}_{1}^{\;h}(\mathbf{k},t)$ ist dann gegeben durch

$$\underline{S}_{1}^{h}(\mathbf{k}, t=0) = -\frac{Q^{2}}{2\nu k^{2}}\underline{B}(\mathbf{k})\underline{S}_{0}(\mathbf{k}, t=0), \qquad (4.48)$$

woraus sich die vollständig in den Ort transformierte statische Lösung für $\underline{S}_1(\mathbf{r}, t = 0)$ ergibt:

$$\begin{split} \underline{S}_{1}(\mathbf{r},0) &= \\ &- \frac{Q^{2}}{\nu} \frac{1}{32\pi r} \begin{pmatrix} -2(-1+3\hat{r}_{x}^{2})\hat{r}_{x}\hat{r}_{y} & \hat{r}_{z}^{2}+3\hat{r}_{z}^{2}\hat{r}_{x}^{2}-5\hat{r}_{x}^{2}+3\hat{r}_{x}^{4} & -6\hat{r}_{z}\hat{r}_{y}\hat{r}_{x}^{2} \\ \hat{r}_{z}^{2}+3\hat{r}_{z}^{2}\hat{r}_{x}^{2}-5\hat{r}_{x}^{2}+3\hat{r}_{x}^{4} & 0 & 3(\hat{r}_{z}^{2}-2+\hat{r}_{x}^{2})\hat{r}_{z}\hat{r}_{x} \\ &-6\hat{r}_{z}\hat{r}_{y}\hat{r}_{x}^{2} & 3(\hat{r}_{z}^{2}-2+\hat{r}_{x}^{2})\hat{r}_{z}\hat{r}_{x} & -2(3\hat{r}_{z}^{2}-1)\hat{r}_{x}\hat{r}_{y} \end{pmatrix}. \end{split}$$

Für den in der Scherrate quadratischen Beitrag

$$\underline{S}_{2}(\mathbf{k},\omega) = \frac{Q^{2}}{2\nu k^{2}} \left(\left(-i\omega + \nu k^{2} \right)^{-1} + \left(i\omega + \nu k^{2} \right)^{-1} \right)^{2} \underline{B}(\mathbf{k}) \left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}} \right) \underline{B}(\mathbf{k})^{\dagger}$$
(4.49)

erhält man nach einer Partialbruchzerlegung und anschließender Rücktransformation in die Zeit den Ausdruck

$$\begin{split} \underline{S}_{2}(\mathbf{k},t) &= \frac{Q^{2}}{2\nu k^{2}} \underline{B}\left(\mathbf{k}\right) \left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right) \underline{B}\left(\mathbf{k}\right)^{\dagger} \\ \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \,\Theta(t-\tau) \Theta(\tau) e^{-\nu k^{2}(t-\tau)} e^{-\nu k^{2}\tau} + \Theta(t-\tau) \Theta(-\tau) e^{-\nu k^{2}(t-\tau)} e^{\nu k^{2}\tau} \\ &+ \Theta(-t+\tau) \Theta(\tau) e^{\nu k^{2}(t-\tau)} e^{-\nu k^{2}\tau} + \Theta(-t+\tau) \Theta(-\tau) e^{\nu k^{2}(t-\tau)} e^{\nu k^{2}\tau} \\ &= \frac{Q^{2}}{2\nu^{2}k^{4}} \underline{B}\left(\mathbf{k}\right) \left(\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\right) \underline{B}\left(\mathbf{k}\right)^{\dagger} \left(1 + \nu k^{2}|t|\right) e^{-\nu k^{2}|t|} \,. \end{split}$$

Der zeitliche Verlauf ist symmetrisch und ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Für die statische Lösung von $\underline{S}_2(\mathbf{k}, t = 0)$ gilt:

$$\underline{S}_{2}(\mathbf{k},t=0) = \frac{Q^{2}}{2\nu^{2}k^{4}}\underline{B}(\mathbf{k})\underline{S}_{0}(\mathbf{k},t=0)\underline{B}(\mathbf{k})^{\dagger}$$

$$= \frac{Q^{2}}{\nu^{2}}\frac{1}{2k^{4}} \begin{pmatrix} (1-2\hat{k}_{x}^{2})^{2}(1-\hat{k}_{y}^{2}) & 0 & -2\hat{k}_{x}\hat{k}_{z}(1-2\hat{k}_{x}^{2})(1-\hat{k}_{y}^{2}) \\ 0 & 0 & 0 \\ -2\hat{k}_{x}\hat{k}_{z}(1-2\hat{k}_{x}^{2})(1-\hat{k}_{y}^{2}) & 0 & 4\hat{k}_{x}^{2}\hat{k}_{z}^{2}(1-\hat{k}_{y}^{2}) \end{pmatrix}.$$

$$(4.50)$$

Wie auch schon in [40] für ein einziges Element dieser Korrelationsmatrix gezeigt, gehen die Terme zweiter Ordnung mit k^{-4} . Auch hier haben nur solche Beiträge einen Einfluss auf eine suspendierte Kugel, die auch nach einer Mittelung verbleiben. Es sind dies gerade die Autokorrelationen, die im Gegensatz zu den Kreuzkorrelationen außerdem zu einer Änderung der Energiedichte führen. Da diese in g quadratischen Beiträge positiv sind, führen Sie zu einer Energieerhöhung im Vergleich zur ruhenden Flüssigkeit.

Erhöhung der Gesamtenergie

Die dimensionslose spezifische Energie, gegeben durch $[[e]]_{V_K} := \frac{1}{2} \sum_i [[S_{ii}]]_{V_K} = \frac{Q^2}{V}$, bleibt bis zur linearen Ordnung in der Scherrate g durch den Scherfluss unverändert,⁶ entspricht also weiterhin derjenigen einer ruhenden Flüssigkeit aus Abschnitt 3.40. Betrachtet man jedoch die Korrelationsbeiträge in der Ordnung g^2 aus Gleichung (4.50), so erkennt man, dass hier positive, in **k**-symmetrische Ergänzungen zu den Diagonaltermen auftreten, die schließlich zu einer Erhöhung der thermischen Energiedichte führen. [41]

4.7 Einfluss auf Testteilchen

Im Falle der ruhenden Flüssigkeit wurde im Abschnitt 3.4 eine Beziehung zwischen dem Mittelwert der Korrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen über ein Kugelvolumen und denjenigen der stochastischen Kräfte, die auf eine suspendierte Kugel desselben Volumens wirken, hergestellt. An dieser Stelle soll jetzt untersucht werden, inwiefern der Scherfluss einen Beitrag zu den stochastischen Kräften, die auf eine einzelne Kugel wirken, liefern kann. Dazu wird jetzt der in g lineare Anteil der Korrelationsmatrix, \underline{S}_1 , über ein Kugelvolumen mit dem Radius a gemittelt. Es zeigt sich, dass gerade die Kreuzkorrelation S_{xy} nach der Mittelung erhalten bleibt, die im Falle der ruhenden Flüssigkeit verschwindet. Es gilt daher

$$\begin{split} \left[[S_{xy}] \right]_{V_K}(a) &:= \frac{1}{V_K^2} \int_{V_K(a)} d\mathbf{r} \int_{V_K(a)} d\mathbf{r}' \langle v_x(0, \mathbf{r}) v_y(0, \mathbf{r}') \rangle \\ &= -g \frac{Q^2}{2\nu} \frac{1}{V_K^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \frac{1}{k^2} \Big((1 - 2\hat{k}_x^2)(1 - 2\hat{k}_y^2) \Big) \int_{K(a)} d\mathbf{r} \int_{K(a)} d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= -g \frac{Q^2}{2\nu} \frac{16\pi^2}{V_K^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \frac{1}{k^2} (1 - 2\hat{k}_x^2)(1 - 2\hat{k}_y^2) \Big(\frac{\sin(ka)}{k^3} - a \frac{\cos(ka)}{k^2} \Big)^2 \\ &= -g \frac{8\pi}{255} \frac{Q^2}{\nu} \frac{a^5}{V_K^2} = -\frac{2}{75} \frac{Q^2}{V_K} \operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a} \end{split}$$
(4.51)

mit dem Kugelvolumen $V_K = \frac{4}{3}\pi a^3$. Mit der charakteristischen Länge $L = \check{a}$ erhält man die auf den Kugelradius bezogene Reynoldszahl Re^{$\dot{\gamma},a$} := $\frac{ga^2}{\nu} = \frac{\check{\gamma}\check{a}^2}{\check{\nu}}$.⁷

 $^{^{6}}$ Die Diagonalterme von $[[\underline{S}\,]]_{V_{K}}$ hängen erst in der Ordnung g^{2} von der Scherrate ab.

⁷ Für Wasser ergibt sich mit einer Viskosität von $\check{\nu} = 10^{-6} \frac{m^2}{s}$ für eine Kugel vom Radius $\check{a} = 1$ mm und einer Scherrate von $\check{\gamma} = 1/s$ gerade eine Reynoldszahl von Re^{$\dot{\gamma},a$} = 1.

Bildet man das Verhältnis der gemittelten Korrelation (4.51) mit der in (3.37) für die ruhende Flüssigkeit erhaltenen Komponente $[[S_{xx}]]_{V_{K}}$, so ergibt sich

$$\lambda := -\frac{[[S_{xy}]]_{V_K}(a)}{[[S_{xx}]]_{V_K}} = \frac{\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{25} = 0.04 \operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}.$$
(4.52)

Damit ist die gesamte über das Kugelvolumen gemittelte Korrelationsmatrix wie folgt darstellbar:

$$[[\underline{S}]]_{V_{K}} = \langle [\mathbf{v}]_{V_{K}} [\mathbf{v}]_{V_{K}} \rangle = \frac{2}{3} \frac{Q^{2}}{V_{K}} \begin{pmatrix} 1 & -\lambda & 0 \\ -\lambda & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (4.53)

Im Grenzwert kleiner Scherraten, $\lambda \to 0$, folgen die Geschwindigkeitsfluktuationen einer Maxwell-Boltzmann Verteilung. Wir nehmen für die folgende qualitative Diskussion an, dass dies für kleine λ noch näherungsweise der Fall ist. Die Verteilung ist also gleich

$$\mathcal{P}([\mathbf{v}]_{V_K}) \sim \exp\left(-[\mathbf{v}]_{V_K}^T [[\underline{S}\,]]_{V_K}^{-1} [\mathbf{v}]_{V_K}\right). \tag{4.54}$$

Die wesentliche Änderung von (4.53) durch den Scherfluss ist das Auftreten der Nichtdiagonalelemente und entsprechend wird mit $\lambda \neq 0$ die Verteilung (4.54) nicht mehr isotrop sein. Mit Hilfe einer Hauptachsentransformation von $[[\underline{S}]]_{V_K}$ aus Gleichung (4.53) findet man die Drehmatrix

$$\underline{R} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} & \sin\frac{\pi}{4} & 0\\ -\sin\frac{\pi}{4} & \cos\frac{\pi}{4} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$
(4.55)

mit der die Matrix $[[\underline{S}]]_{V_K}^{-1}$ diagonalisiert werden kann:

$$\underline{R}\left[[\underline{S}\,]\right]_{V_K}^{-1}\underline{R}^T = \left[\left[\underline{\tilde{S}}\,\right]\right]_{V_K}^{-1} = \left(\frac{2Q^2}{3V_K}\right)^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{1-\lambda} & 0\\ 0 & \frac{1}{1+\lambda} \end{pmatrix} \,. \tag{4.56}$$

Umgekehrt kann man somit $[[\underline{S}]]_{V_K}^{-1} = \underline{R}^T \left[\left[\underline{\tilde{S}} \right] \right]_{V_K}^{-1} \underline{R}$ in der Verteilungsfunktion (4.54) ersetzen,

$$\mathcal{P}([\mathbf{v}]_{V_K}) \sim \exp\left(-\left[\mathbf{v}\right]_{V_K}^T \underline{R}^T \left[\left[\underline{\tilde{S}}\right]\right]_{V_K}^{-1} \underline{R} \left[\mathbf{v}\right]_{V_K}\right), \qquad (4.57)$$

und erhält mit den transformierten Geschwindigkeitsvektoren $[\mathbf{v}']_{V_K} = \underline{R} [\mathbf{v}]_{V_K}$ für das Argument der Exponentialfunktion die Gleichung

$$-\left(\frac{[\mathbf{v}'_{x}]^{2}_{V_{K}}}{(1-\lambda)} + \frac{[\mathbf{v}'_{y}]^{2}_{V_{K}}}{(1+\lambda)} + [\mathbf{v}'_{z}]^{2}_{V_{K}}\right) = -Z^{2}.$$
(4.58)

Dies entspricht einer Ellipsoidengleichung, ist also auf einem Ellipsoid mit den Halbachsen $\sqrt{1-\lambda}$, $\sqrt{1+\lambda}$ und 1 konstant gleich $-Z^2$ und zwar für beliebige Z. Das bedeutet gleichzeitig, dass für alle \mathbf{v}' , die sich auf dem selben so definierten Ellipsoiden befinden, die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}([\mathbf{v}]'_{V_K})$ gleich groß ist. Insbesondere ergibt sich für $Z = \sqrt{\frac{2}{3V_K} \ln 2}$ die Halbwertsbreite der Verteilung. In *x*-Richtung liegt für positive λ die kleinste und in *y*-Richtung die größte der Halbachsen. Die Rücktransformation mit \underline{R}^T entspricht einer Drehung der Geschwindigkeiten zu $[\mathbf{v}]_{V_K} = \underline{R}^T [\mathbf{v}']_{V_K}$ um den Winkel $\frac{\pi}{4}$ relativ zur *x*-Achse.⁸ Die Ellipse hat somit für positive Scherraten und damit positiven Werten für λ die in Abbildung 4.9 dargestellte Form.



Abb. 4.9: Links ist die Ellipse mit der durchgezogenen Linie die Geschwindigkeitsverteilung für positive Scherraten in der xy-Ebene. Die gestrichelte Linie zeigt den Fall ohne Scherung. Die beiden Kurven in der Mitte zeigen die Projektion der Verteilung auf die x- beziehungsweise y-Achse des Ursprungssystems, welches im linken Bild durch die grünen Achsen angedeutet ist. Die Kurven sind gleichartig und entsprechen derjenigen einer kreisförmigen Verteilung. Betrachtet man die Verteilung aber entlang der links mit rot gezeichneten Achsen, so erkennt man in den rechten Graphen, dass die Verteilung in x'-Richtung schmaler, und in y'-Richtung breiter ist (durchgezogene Linien). Die kreisförmige Verteilung (gestrichelte Linie) ändert sich bei Drehung der Achsen nicht. In den beiden rechten Bildern wurden jeweils durch die gepunkteten Linien gleich große Werte der Verteilung markiert. Dies kann zum Beispiel für die Wahl von $Z = \sqrt{\frac{3}{2Q^2} \ln 2}$ in Gleichung (4.58) bei der halben Höhe der Verteilung sein.

Im Abschnitt 3.4 wurde eine Relation zwischen den Elementen der Matrix (4.53) für $\lambda = 0$ und der Korrelation der in Abschnitt 2.5 eingeführten, auf eine Kugel wirkenden stochastischen Kräfte $\mathbf{f}^{S}(t)$ motiviert. Nimmt man an, dass diese Beziehung auch weiterhin für kleine λ gilt, so lässt sich die Korrelation der stochastischen Kräfte mit Hilfe der in Gleichung (3.38) definierten Konstanten $\varepsilon = 3\zeta_0 V_K \delta(t - t')$ wie folgt abschätzen:

$$\langle \mathbf{f}^{s}(t)\mathbf{f}^{s}(t')\rangle = \frac{2}{3V_{K}}Q^{2}\varepsilon \begin{pmatrix} 1 & -\lambda & 0\\ -\lambda & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(4.59)

⁸ Es gilt $\underline{R}^T \hat{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$ und $\underline{R}^T \hat{e}_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)$, so dass es sich um eine Drehung entgegen dem Uhrzeigersinn handelt.

Die stochastischen Kräfte gehen in die Bewegungsgleichung (2.43) für eine Kugel der Masse \check{m} ein, die sich an der Position \check{y}_0 befindet. Mit dimensionsbehafteten Größen ergibt sich dann die Bewegungsgleichung für eine Kugel, die sich mit der Geschwindigkeit $\check{\mathbf{u}}_K$ in der Flüssigkeit bewegt,

$$\check{m}\frac{d}{d\check{t}}\check{\mathbf{u}}_{K}(t) = -\check{\zeta}_{0}\check{\mathbf{u}}_{K}(t) + \check{\zeta}_{0}\check{\gamma}\check{y}\hat{e}_{x} + \check{\mathbf{f}}^{s}(\check{t}).$$

$$(4.60)$$

Die Abschätzung (4.59) für die Korrelation der stochastischen Kräfte lautet unter Berücksichtigung der Dimensionen

$$\langle \check{\mathbf{f}}^{s}(\check{t})\check{\mathbf{f}}^{s}(\check{t}')\rangle = 2k_{B}T\check{\zeta}_{0}\begin{pmatrix} 1 & -\lambda & 0\\ -\lambda & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\delta(\check{t}-\check{t}').$$
(4.61)

Es ist $\zeta_0 = 6\pi\eta a$ die Stokessche Reibungskonstante. Die Korrelation der Kugelposition und -geschwindigkeit, die durch die Gleichungen (4.60) und (4.61) beschrieben werden, wurden in Referenz [36, 37] berechnet.

Die Gleichungen dienen hierbei nur als Abschätzung. Da die Zeitabhängigkeit des Fluktuationsfeldes der Flüssigkeit unsymmetrisch in der Zeit ist, ist davon auszugehen, dass auch die stochastischen Kräfte nicht einer $\delta(t - t')$ -Korrelation gehorchen. Zur exakten Bestimmung der Korrelationen der stochastischen Kräfte $\mathbf{f}^s(t)$ müssen die Gleichungen (2.42) gelöst werden. Dies sollte mit der analytischen Darstellung der spektralen Dichte aus Gleichung (4.41) zusammen mit den Gleichungen (4.43) und (4.44) eine lösbare Aufgabe darstellen.

4.8 Lineare Response

Im Abschnitt 3.5 wurde in Gleichung (3.55) ein Zusammenhang zwischen der Laplacetransformation der Suszeptibilität und der Relaxationsfunktion abgeleitet, wonach für die Suszeptibilität gilt:

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},s) = \left(is\underline{R}_g(\mathbf{k},s) + \underline{I}\right)\underline{\chi}(\mathbf{k}).$$
(4.62)

Setzt man hier die Relaxationsfunktion

$$\underline{R}_g(\mathbf{k},s) = \left(\underline{I} - g(-is + \nu k^2)^{-1} \underline{B}(\mathbf{k})\right) (-is + \nu k^2)^{-1}$$
(4.63)

für den Scherfluss aus Gleichung (4.39) ein, ergibt sich für die Laplace-Transformierte der dynamischen Suszeptibilität

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},s) = \left(is(\underline{I} - g(-is + \nu k^2)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k}))(-is + \nu k^2)^{-1} + \underline{I}\right)\underline{\chi}(\mathbf{k})$$
$$= \left(\nu k^2 \underline{I} - isg(-is + \nu k^2)^{-1}\underline{B}(\mathbf{k})\right)(-is + \nu k^2)^{-1}\underline{\chi}(\mathbf{k})$$

67

und mit $s = \omega + i\epsilon$ ergibt sich für $\epsilon \to 0$ entsprechend

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},\omega) = \left(\frac{\nu k^2}{(-i\omega+\nu k^2)}\underline{I} - g\frac{i\omega}{(-i\omega+\nu k^2)^2}\underline{B}(\mathbf{k})\right)\underline{\chi}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\nu k^2(i\omega+\nu k^2)}{(\omega^2+\nu^2 k^4)}\underline{I} + g\frac{i\omega(\omega^2-\nu^2 k^4)+2\omega^2\nu k^2)}{(\omega^2+\nu^2 k^4)^2}\underline{B}(\mathbf{k})\right)\underline{\chi}(\mathbf{k}).$$
(4.64)

Es soll weiterhin die Aufspaltung

$$\underline{\chi}(\mathbf{k},\omega) = \underline{\chi}'(\mathbf{k},\omega) + i\underline{\chi}''(\mathbf{k},\omega)$$
(4.65)

gelten. Da die Gesamtlösung jedoch auch in der Zeit antisymmetrische Beiträge enthält, gilt die einfache Form des Fluktuations-Dissipations Theorems (3.44) nicht mehr und muss angepasst werden.

Symmetrie bei Zeitspiegelungen

Für den mit s indizierten und in der Zeit symmetrischen Anteil der Korrelation gilt

$$S_{ij}^{s}(t) = S_{ij}^{s}(-t) = S_{ji}^{s}(t), \qquad (4.66)$$

und somit im Frequenzraum die Beziehung

$$\underline{S}^{s}(\omega) = [\underline{S}^{s}]^{T}(\omega).$$
(4.67)

Für den mit dem Index a versehenen, in der Zeit antisymmetrischen Beitrag zur Korrelation erhält man hingegen

$$S_{ij}^{a}(t) = -S_{ij}^{a}(-t) = -S_{ji}^{a}(t), \qquad (4.68)$$

wodurch sich im Frequenzraum die Beziehung

$$\underline{S}^{a}(\omega) = -[\underline{S}^{a}]^{T}(\omega), \qquad (4.69)$$

ergibt. Aus der Gesamtkorrelation $\underline{S}(\omega)$ erhält man somit die in der Zeit symmetrischen und antisymmetrischen Anteile mit Hilfe von

$$\underline{S}^{s}(\omega) = \frac{1}{2} \left(\underline{S}(\omega) + \underline{S}^{T}(\omega) \right),$$

$$\underline{S}^{a}(\omega) = \frac{1}{2} \left(\underline{S}(\omega) - \underline{S}^{T}(\omega) \right).$$
(4.70)

Im konkreten Fall des Scherflusses erhält man aus den Gleichungen (4.42) bis (4.44) für die symmetrische spektrale Dichte

$$Q^{-2}\underline{S}^{s}(\omega) = \frac{2\nu k^{2}}{\omega^{2} + \nu^{2}k^{4}}\underline{S}(0) - g\frac{2\nu^{2}k^{4}}{(\omega^{2} + \nu^{2}k^{4})^{2}} (\underline{B}\underline{S}_{0}(0) + \underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}) + g^{2}\frac{2\nu k^{2}}{(\omega^{2} + \nu^{2}k^{4})^{2}}\underline{B}\underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}$$
(4.71)

und für die antisymmetrische

$$Q^{-2}\underline{S}^{a}(\omega) = -i\omega g \frac{2\nu k^{2}}{(\omega^{2} + \nu^{2}k^{4})^{2}} \left(\underline{B}\underline{S}_{0}(0) - \underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}\right).$$

$$(4.72)$$

Es wurden zugunsten der besseren Lesbarkeit die Abhängigkeiten von **k** nicht angegeben und die statische Korrelation der ruhenden Flüssigkeit mit $\underline{S}_0(0) = \underline{S}_0(t = 0)$ abgekürzt.

Die gleiche Aufspaltung kann man jetzt für die dynamische Suszeptibilität (4.64) durchführen und erhält mit der Zerlegung (4.65) für die in der Zeit symmetrischen Anteile

$$\underline{\chi}^{'s}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\nu^2 k^4}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)} \Big(\underline{\chi}(0) + \underline{\chi}^T(0) \Big) + \omega^2 g \frac{\nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \Big(\underline{B} \underline{\chi}(0) + \underline{\chi}(0) \underline{B}^T \Big) ,$$

$$\underline{\chi}^{''s}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\omega \nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)} \Big(\underline{\chi}(0) + \underline{\chi}^T(0) \Big) + \frac{g}{2} \omega \frac{(\omega^2 - \nu^2 k^4)}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \Big(\underline{B} \underline{\chi}(0) + \underline{\chi}(0) \underline{B}^T \Big)$$
(4.73)

und für die antisymmetrischen

$$\underline{\chi}^{'a}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\nu^2 k^4}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)} \left(\underline{\chi}(0) - \underline{\chi}^T(0) \right) + \omega^2 g \frac{\nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \left(\underline{B} \underline{\chi}(0) - \underline{\chi}(0) \underline{B}^T \right),$$

$$\underline{\chi}^{''a}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\omega \nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)} \left(\underline{\chi}(0) - \underline{\chi}^T(0) \right) + \frac{g}{2} \omega \frac{(\omega^2 - \nu^2 k^4)}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \left(\underline{B} \underline{\chi}(0) - \underline{\chi}(0) \underline{B}^T \right).$$
(4.74)

Die statische Suszeptibilitä
t $\underline{\chi}\,(0)$ erhält man jetzt aus der statischen Korrelation über die Gleichungen
 (4.48) und (4.50)zu

$$\underline{\chi}(0) = Q^{-2}\underline{S}(t=0) = \underline{S}_{0}(0) - \frac{g}{2\nu k^{2}}(\underline{B}\underline{S}_{0}(0) + \underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}) + \frac{g^{2}}{2\nu^{2}k^{4}}\underline{B}\underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}$$

und mit Hilfe der Eigenschaften $\underline{B\,B}\,=0$ gilt weiter

$$\underline{\chi}(0) + \underline{\chi}^{T}(0) = 2\underline{S}_{0}(0) - \frac{g}{\nu k^{2}}(\underline{B}\underline{S}_{0}(0) + \underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}) + \frac{g^{2}}{\nu^{2}k^{4}}\underline{B}\underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T},$$

$$\underline{\chi}(0) - \underline{\chi}^{T}(0) = 0,$$

$$\underline{B}\underline{\chi}(0) + \underline{\chi}^{T}(0)\underline{B}^{T} = \underline{B}\underline{S}_{0}(0) + \underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T} - \frac{g}{\nu k^{2}}\underline{B}\underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T},$$

$$\underline{B}\underline{\chi}(0) - \underline{\chi}^{T}(0)\underline{B}^{T} = \underline{B}\underline{S}_{0}(0) - \underline{S}_{0}(0)\underline{B}^{T}.$$
(4.75)

Aus den obigen Gleichungen (4.73) und (4.74) folgen dann

$$\underline{\chi}^{\prime a}(\omega) = \omega^2 g \frac{\nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \left(\underline{B} \underline{S}_0(0) - \underline{S}_0(0) \underline{B}^T\right)$$
(4.76)

und

$$\underline{\chi}^{''s}(\omega) = \omega \frac{\nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)} \underline{S}_0(0) - g\omega \frac{\nu^2 k^4}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \Big(\underline{B} \underline{S}_0(0) + \underline{S}_0(0) \underline{B}^T \Big) + g^2 \omega \frac{\nu k^2}{(\omega^2 + \nu^2 k^4)^2} \underline{B} \underline{S}_0(0) \underline{B}^T , \qquad (4.77)$$

69

die nach einem Vergleich mit den Anteilen der spektralen Dichte (4.71) und (4.72) zu dem Fluktuations-Dissipations Theorem in der Form

$$\underline{S}^{s}(\omega) = \frac{2Q^{2}}{\omega} \underline{\chi}^{''s}(\omega),$$

$$\underline{S}^{a}(\omega) = -i \frac{2Q^{2}}{\omega} \underline{\chi}^{'a}(\omega)$$
(4.78)

führen, wie es auch mit anderen Bezeichungen in [62] zu finden ist.

Oseen-Tensor

Da die statische Suszeptibilität durch den Scherfluss gegenüber der ruhenden Flüssigkeit verändert wird, ist zu erwarten, dass sich auch der Oseen-Tensor ändert. Mit der Beziehung aus Gleichung (3.64) erhält man für den scherratenabhängigen Oseen-Tensor

$$\underline{\Omega}_{g}(\mathbf{k}) = \frac{\underline{\chi}^{''s}(\omega)}{\omega} \\
= (\nu k^{2})^{-1} \left(\underline{\chi}_{0}(0) - \frac{g}{\nu k^{2}} (\underline{B} \underline{\chi}_{0}(0) + \underline{\chi}_{0}(0) \underline{B}^{T}) + \frac{g^{2}}{\nu^{2} k^{4}} \underline{B} \underline{\chi}_{0}(0) \underline{B}^{T} \right), \quad (4.79)$$

der die stationäre Änderung der Flüssigkeit aufgrund einer Punktkraft beschreibt.

Eine Rücktransformation dieses Ausdrucks für den Oseen-Tensor in den Ortsraum wäre für Simulationen mehrerer Brownscher Teilchen im Scherfluss von sehr praktischer Bedeutung. Der Beitrag in führender Ordnung der Scherratenkorrektur ist proportional zu k^{-4} .

4.9 Zusammenfassung

Nachdem in Abschnitt 4.1 gezeigt wurde, wie sich die Bewegungsgleichungen für die thermischen Fluktuationen in einer Flüssigkeit bei einer Scherströmung im Vergleich zur ruhenden Flüssigkeit ändern, wurde in den folgenden Abschnitten eine Näherungslösung für den Fall einer Scherströmung erarbeitet, falls die Wände weit entfernt vom Beobachtungspunkt sind. Dazu wurden die Bewegungsgleichungen im Abschnitt 4.3 im Frequenz- und Wellenzahlraum gelöst und formal in die Zeit zurücktransformiert. Im Abschnitt 4.4 wurde die statische Kreuzkorrelation $\langle v_x(\mathbf{r}v_y(0) \rangle$ berechnet und deren Parameterabhängigkeit im Abschnitt 4.5 eingehend diskutiert. Wie das Vorzeichen dieser Kreuzkorrelation vom Differenzortsvektor \mathbf{r} abhängt wurde als Funktion verschiedener Parameter diskutiert. Im Abschnitt 4.6 wurde gezeigt, dass bei einer Entwicklung der Geschwindigkeitskorrelation nach der Scherrate g alle Terme höherer Ordnung als g^2 verschwinden. Wie sich diese Kreuzkorrelation der Fluidgeschwindigkeiten auf ein suspendiertes Testteilchen auswirken, wurde im Abschnitt 4.7 berechnet und es wurde auch die asymmetrische Verteilungsfunktion eines Testteilchen berechnet. Im Abschnitt 4.8 wurden auch die führenden scherratenabhängigen Korrekturen zum Oseen-Tensor im Fourierraum berechnet.

5 Fluktuationen in einer ebenen Couette-Strömung

Ein linearer Schergradient wird typischerweise in einer ebenen Couette-Strömung wie in Abbildung 5.1 realisiert, also durch zwei sich gegeneinander bewegende Wände erzeugt. Um in einem ersten Schritt charakteristische Auswirkungen des Scherfeldes auf das Spektrum der hydrodynamischen Fluktuationen zu untersuchen, wurde im letzten Abschnitt der Einfluss der Wände vernachlässigt. Demgegenüber soll in diesem Abschnitt die Haftung der Flüssigkeit an den Wänden einbezogen und die entsprechenden Auswirkungen auf die Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen berücksichtigt werden.



Abb. 5.1: Skizze einer ebenen Couette-Strömung $\mathbf{u}_0 = gy\hat{e}_x$. Die beiden Wände liegen senkrecht zur *y*-Achse und bewegen sich mit betragsgleicher Geschwindigkeit in entgegengesetzten Richtungen entlang der *x*-Achse. Die Strömungsrichtung ist parallel zur *x*-Achse und der Schergradient entlang der *y*-Achse. Beide Richtungen spannen die orthogonal zur *z*-Achse liegende Scherebene auf.

Die im vorangegangenen Kapitel 4 verwendete Näherung wird nicht weiter benutzt, so dass die hier gefundenen Ergebnisse im Grenzfall großer Plattenabstände auch als Test für die zuvor bestimmten analytischen Lösungen in einem unendlichen System dienen können.

Das Kapitel ist wie folgt gegliedert: In Abschnitt 5.1 werden die Grundgleichungen in ein allgemeines Funktionensystem entwickelt, wobei die in Betracht kommenden Funktionen die Randbedingungen entweder exakt oder näherungsweise erfüllen. Dabei werden die Bewegungsgleichungen in Gleichungen für die Entwicklungskoeffizienten übergeführt, womit sich die Korrelation der Fluktuationen auch durch die Korrelation dieser Entwicklungskoeffizienten darstellen lässt. Entsprechend erben letztere die Symmetrieeigenschaften der Fluktuationen, wie sie in Abschnitt 5.2 erläutert werden. Wie im vorhergehenden Kapitel werden die Korrelationen anschließend im Abschnitt 5.3 in eine Taylorreihe bis zur quadratischen Ordnung in der Scherrate um die ruhende Flüssigkeit entwickelt und die allgemeinen Lösungen für die spektrale Dichte angegeben. In Abschnitt 5.4 wird schließlich ein konkretes Funktionensystem benutzt, welches garantiert, dass die Geschwindigkeitsfluktuationen die Haftbedingungen an den Wänden erfüllen und damit verschwinden. Die Lösungen für die Korrelationen der transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen werden ausführlich analysiert und mit der Näherungslösung aus dem vorangegangenen Kapitel 4 verglichen. Zum Abschluss wird in Abschnitt 5.5 beschrieben, wie sich die Berücksichtigung der longitudinalen Anteile der Geschwindigkeitsfluktuationen und der Dichtefluktuationen auf die Berechnung auswirkt und es werden hierfür formal zeitabhängige und stationäre Lösungen angegeben.

5.1 Allgemeiner Formalismus

Ausgangspunkt für die weitere Berechnung sind abermals die im Anhang A hergeleiteten Bewegungsgleichungen für die Geschwindigkeitsfluktuationen in einer Scherströmung:

$$(\partial_t + gy\partial_x)\nabla\rho + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}^l) = 0, \qquad (5.1a)$$

$$(\partial_t - \nu \alpha \triangle + gy \partial_x) \triangle \mathbf{v}^l + c^2 \triangle \nabla \rho + 2g \partial_x \nabla (v_y^l + v_y^t) + g \partial_x (\nabla \cdot \mathbf{v}^l) \hat{\mathbf{e}}_y = \nabla H , \qquad (5.1b)$$

$$\left(\partial_t - \nu \triangle + gy \partial_x \right) \triangle \mathbf{v}^t + g \begin{pmatrix} \triangle (v_y^t + v_y^l) - 2\partial_x (\partial_x v_y^t - \partial_y v_x^t) \\ -\Delta v_x^l \\ 2\partial_x (\partial_y v_z^t - \partial_z v_y^t) \end{pmatrix} = -\mathbf{G} .$$
 (5.1c)

5.1.1 Planare Fouriertransformation

Das betrachtete System wird in x- und z-Richtung weiterhin als unendlich ausgedehnt angenommen, weshalb in beide Richtungen eine Fouriertransformation der linearen Gleichungen (5.1) möglich ist. Der Wellenzahlvektor in der davon aufgespannten, parallel zu den Wänden liegenden Ebene wird durch $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_x, 0, \kappa_z)$ und der Ortsvektor durch $\mathbf{r} = (x, 0, y)$ beschrieben. Mit der Fouriertransformation in zwei Raumdimensionen

$$\mathbf{v}^{(l,t)}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) = \int dx \, dz \, \mathbf{v}^{(l,t)}(\mathbf{r}, t) \, e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} ,$$
$$\mathbf{v}^{(l,t)}(\mathbf{r}, y, t) = \int \frac{d\kappa_x \, d\kappa_z}{(2\pi)^2} \mathbf{v}^{(l,t)}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \, e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}}$$
(5.2)

und der verschwindenden Rotation, $\nabla \times \mathbf{v}^l = 0$, erhält man drei nützliche Beziehungen zwischen den longitudinalen Geschwindigkeitskomponenten

$$\partial_y v_z^l(\boldsymbol{\kappa}, y) = i\kappa_z v_y^l(\boldsymbol{\kappa}, y),$$

$$\kappa_z v_x^l(\boldsymbol{\kappa}, y) = \kappa_x v_z^l(\boldsymbol{\kappa}, y),$$

$$\partial_y v_x^l(\boldsymbol{\kappa}, y) = i\kappa_x v_y^l(\boldsymbol{\kappa}, y).$$
(5.3)

Demzufolge sind $v_x^l(\pmb{\kappa},y)$ und $v_z^l(\pmb{\kappa},y)$ zu
einander proportional und man kann die Darstellung

$$\mathbf{v}^{l,\parallel}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) = \begin{pmatrix} v_x^l(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \\ 0 \\ v_z^l(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \frac{\kappa_x}{\kappa} v^{l,\parallel}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \\ 0 \\ \frac{\kappa_z}{\kappa} v^{l,\parallel}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \end{pmatrix} = \frac{\boldsymbol{\kappa}}{\kappa} v^{l,\parallel}(\boldsymbol{\kappa}, y, t)$$
(5.4)

wählen, worin $\kappa = |\kappa| = \sqrt{\kappa_x^2 + \kappa_z^2}$ den Betrag des zweidimensionalen Wellenzahlvektors beschreibt. Ganz offensichtlich ist $v^{l,\perp}$ die *y*-Komponente und man erhält mit $v^{l,\perp}(\kappa, y, t) := v_y^l(\kappa, y, t)$ die Beziehung

$$v^{l,\perp}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) = -\frac{i}{\kappa} \partial_y v^{l,\parallel}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \,. \tag{5.5}$$

Auf Grund dieser direkten Zusammenhänge zwischen den Komponenten der longitudinalen Geschwindigkeitsfluktuationen genügt es hiervon in der weiteren Rechnung ausschließlich die Komponente $v^{l,\parallel}$ zu betrachten, indem man in der Bewegungsgleichung (5.1) zwei longitudinale Beiträge mit Hilfe von (5.4) und (5.5) ersetzt. Mit den gleichen Beziehungen kann man am Ende aus der Lösung für $v^{l,\parallel}$ die ersetzten Komponenten bestimmen.¹

Die räumlichen Fouriertransformationen der verbleibenden fünf Gleichungen (5.1) für die Dichte ρ , die longitudinale Geschwindigkeitsfluktuation $v^{l,\parallel}$, und die drei transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen v_x^t , v_y^t und v_z^t sind äquivalent mit den Substitutionen

$$\partial_x \to i\kappa_x$$
, $\partial_z \to i\kappa_z$, $\Delta \to -(\kappa^2 - \partial_y^2) =: \Delta_{\kappa y}$. (5.6)

5.1.2 Matrixoperatoren

Die nach longitudinalen sowie transversalen Komponenten aufgespaltenen Geschwindigkeits- und Dichtefluktuationen und die stochastischen Kräfte bilden die folgenden beiden Vektoren

$$\mathbf{X} := (\rho, v^{l||}, v^t_x, v^t_y, v^t_z) \quad \text{und} \qquad \mathbf{P} := (0, i\kappa H, -G_x, -G_y, -G_z). \tag{5.7}$$

¹ In der unendlich ausgedehnten Flüssigkeit gilt immer, dass die longitudinale Geschwindigkeitskomponente entlang dem dreidimensionalen Wellenzahlvektor **k** zeigt. Aufgrund der Beziehung (5.4) gilt dies bei der Couette-Strömung für den in der *xz*-Ebene liegenden Anteil $\hat{\mathbf{v}}^{l,\parallel} = \hat{\boldsymbol{\kappa}}$.

,

Weiterhin werden die Operatoren aus den Gleichungen (5.1) in folgenden Matrixoperatoren zusammengefasst:

$$\underline{\mathcal{I}} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{\kappa y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_{\kappa y} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_{\kappa y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_{\kappa y} \end{pmatrix},$$

$$\underline{\mathcal{M}}_{0} := \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\kappa} \Delta_{\kappa, y} & 0 & 0 & 0 \\ i\kappa c^{2} \Delta_{\kappa, y} & -\nu \alpha \Delta_{\kappa, y}^{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\nu \Delta_{\kappa, y}^{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\nu \Delta_{\kappa, y}^{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu \Delta_{\kappa, y}^{2} \end{pmatrix},$$
(5.8)

$$\underline{\mathcal{M}}_{g} := \begin{pmatrix} i\kappa_{x}y & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\kappa_{x}(y\Delta_{\kappa,y}+2\partial_{y}) & 0 & -2\kappa\kappa_{x} & 0 \\ 0 & -\frac{i}{\kappa}\Delta_{\kappa,y}\partial_{y} & i\kappa_{x}(y\Delta_{\kappa,y}+2\partial_{y}) & \Delta_{\kappa,y}+2\kappa_{x}^{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\kappa_{x}}{\kappa}\Delta_{\kappa,y} & 0 & i\kappa_{x}y\Delta_{\kappa,y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\kappa_{x}\kappa_{z} & i\kappa_{x}(y\Delta_{\kappa,y}+2\partial_{y}) \end{pmatrix}.$$
(5.10)

Definiert man die Summe der letzten beiden Matrizen als

$$\underline{\mathcal{M}} := \underline{\mathcal{M}}_0 + \underline{g}\underline{\mathcal{M}}_g \,, \tag{5.11}$$

so kann man die Bewegungsgleichungen (5.1) im Fourierraum auch in Form einer Matrix-gleichung schreiben:

$$\sum_{j} \left(\mathcal{J}_{ij} \partial_t + \mathcal{M}_{ij} \right) X_j = P_i \,. \tag{5.12}$$

5.1.3 Funktionenentwicklung senkrecht zu den Wänden

Die betrachtete Flüssigkeit ist bei der Couette-Strömung (Abbildung 5.1) in y-Richtung durch Wände begrenzt, an denen die Geschwindigkeit der Flüssigkeit spezielle Randbedingungen erfüllen muss. In diese Richtung kann daher keine Fouriertransformation durchgeführt werden. Stattdessen werden die Felder bezüglich ihrer y-Abhängigkeit in ein System von Funktionen entwickelt. Mit Hilfe der Chandrasekhar-Funktionen² [63] können die

 $^{^{2}}$ Siehe hierzu auch Abschnitt 5.4.

Randbedingungen in einer inkompressiblen Flüssigkeit (2.19) zum Beispiel exakt erfüllt werden. Um die folgende Rechnung übersichtlicher zu halten, soll die *y*-Abhängigkeit der Felder hier durch diejenige Untermenge der harmonischen Funktionen dargestellt werden, welche an den Wänden bei $y = \pm \frac{d}{2}$ verschwinden, aber die vollständigen Randbedingungen nur näherungsweise erfüllen. Bevor im Abschnitt 5.4 dieses spezielle Funktionensystem Verwendung findet, wird die weitere Rechnung vorerst möglichst allgemein gehalten. Somit bleibt ohne großen Aufwand weiter die Möglichkeit, bei Bedarf das Funktionensystem zu wechseln und einem anderen Zweck anzupassen.

Die Lösungsvektoren können in ihre bezüglich y = 0 symmetrischen $\mathbf{X}_{-}(y)$ und antisymmetrischen Anteile $\mathbf{X}_{\sim}(y)$ aufgespalten werden, wobei im Folgenden $\mathbf{X}_{\alpha}(y)$, mit $\alpha \in \{"-"=1,"\sim"=2\}$, geschrieben wird. Ebenso sollen auch die Basisfunktionen des Funktionensystems gleichartig in Funktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ unterteilt werden. Es bietet sich somit folgender Produktansatz für die Felder im Ortsraum an

$$X_i(\mathbf{r}, y, t) = \sum_{\alpha} \sum_{l=1}^{\infty} \varphi_{\alpha l}(y) \,\mathsf{X}_{(\alpha l i)}(x, z, t) \,, \tag{5.13}$$

oder analog nach einer planaren Fouriertransformation

$$X_{i}(\boldsymbol{\kappa}, y, t) = \sum_{\alpha} \sum_{l=1}^{\infty} \varphi_{\alpha l}(y) \mathsf{X}_{(\alpha l i)}(\boldsymbol{\kappa}, t) \,.$$
(5.14)

5.1.4 Entwicklung nach der Galerkin Methode

Um aus den Bewegungsgleichungen (5.12) für die unendlich dimensionale Darstellung (5.13) der Geschwindigkeits- und Dichtefluktuationen eine Approximation mit endlich vielen Komponenten zu erhalten, projiziert man im Rahmen der Galerkin-Methode die Gleichungen auf eine endliche Anzahl von orthogonalen Basisfunktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ (n = 1...N)des selben Funktionensystems.

Mit dem Skalarprodukt

$$\langle a(y), b(y) \rangle_d := \int_{-d/2}^{d/2} dy \, a(y) b(y) \,,$$
 (5.15)

gilt also für diese orthogonalen Basisfunktionen

$$\langle \varphi_{\alpha n}(y), \varphi_{\beta l}(y) \rangle_d = \delta_{\alpha \beta} \delta_{nl},$$
 (5.16)

wobei $d = \frac{\check{d}}{L}$ der entdimensionalisierte Plattenabstand ist. Damit erhält man mit dem Funktionenansatz aus der Gleichung (5.13) zusammen mit Gleichung (5.12) die Entwicklungskoeffizienten X_(βlj)(κ, t) aus (5.13):

$$\sum_{\beta} \sum_{l=1}^{N} \sum_{j} \left[\left(\mathcal{J}_{ij} \partial_t + \mathcal{M}_{ij} \right) \varphi_{\beta l}(y) \right] \mathsf{X}_{(\beta lj)}(\boldsymbol{\kappa}, t) = P_i(\boldsymbol{\kappa}, y, t) \,. \tag{5.17}$$

Mit der Festlegung auf ein orthogonales Funktionensystem $\varphi_{\beta l}(y)$ kann durch Projektion das System partieller Differentialgleichungen (5.17) auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit überführt werden:

$$\sum_{\beta} \sum_{l}^{N} \sum_{j} \left(\mathsf{J}_{(\alpha n i)(\beta l j)} \partial_{t} + \mathsf{M}_{(\alpha n i)(\beta l j)} \right) \mathsf{X}_{(\beta l j)}(\boldsymbol{\kappa}, t) = \mathsf{P}_{(\alpha n i)} \,. \tag{5.18}$$

Die Tensorfelder hierin ergeben sich aus der Projektion auf die Basisfunktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ und werden mittels folgender Relationen definiert:

$$\mathbf{J}_{(\alpha n i)(\beta l j)} = \langle \varphi_{\alpha n}(y), \left[\mathcal{J}_{ij} \varphi_{\beta l}(y) \right] \rangle_{d}, \\
\mathbf{M}_{(\alpha n i)(\beta l j)} = \langle \varphi_{\alpha n}(y), \left[\mathcal{M}_{ij} \varphi_{\beta l}(y) \right] \rangle_{d}, \\
\mathbf{P}_{(\alpha n i)} = \langle \varphi_{\alpha n}(y), P_{i}(y) \rangle_{d}.$$
(5.19)

Aus der Bewegungsgleichung für die Entwicklungskoeffizienten (5.18) wird im Folgenden die Dynamik der Geschwindigkeitsfluktuationen bestimmt.

5.1.5 Kompaktschreibweise mit Vektoren und Matrizen

Für eine Reihe der weiteren Überlegungen bietet eine Zusammenfassung der Entwicklungskoeffizienten $X_{(\alpha ni)}$ zu Vektoren eine bessere Übersichtlichkeit. Wir fassen in Anlehnung an die Vektoren aus (5.7) die Entwicklungskoeffizienten $X_{(\alpha ni)}$ im Orts- und Fourierraum zu einem Vektor $X_{(\alpha n)}$ zusammen:

$$\mathbb{X}_{(\alpha n)} := (\mathsf{X}_{(\alpha n \rho)}, \dots, \mathsf{X}_{(\alpha n v_z^t)}).$$
(5.20)

Diese bilden wiederum Vektoren

$$\mathbb{X}_{(\alpha)} := (\mathbb{X}_{(\alpha 1)}, \dots, \mathbb{X}_{(\alpha N)}), \qquad (5.21)$$

die schließlich den Gesamtvektor

$$\mathbb{X} := (\mathbb{X}_{(-)}, \mathbb{X}_{(\sim)}) \tag{5.22}$$

ergeben. $X_{(\alpha ni)}$ entspricht dann X_{ν} , wobei man den absoluten Index ν mit $\alpha \in \{"-" = 1, " \sim " = 2\}$ bei insgesamt N Moden je α und den 5 betrachteten Fluktuationsvariablen durch die folgende Formel ermitteln kann:

$$\nu = N(\alpha - 1) + 5(n - 1) + i.$$
(5.23)

Umgekehrt erhält man mit $\mathbb{X}(x, z, t)$ und den Basisfunktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ den Vektor für die Fluktuationen $\mathbf{X}(\mathbf{r}, t)$ in (5.7) durch die Summe

$$\mathbf{X}(\mathbf{r}, y, t) = \sum_{\alpha} \sum_{n} \mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}, t) \varphi_{\alpha n}(y) \,.$$
 (5.24)

Eine Matrix $\underline{\mathbb{M}}$ ist in ähnlicher Weise aus den Elementen von $\mathsf{M}_{(\alpha ni)(\beta lj)}$ aufgebaut:

$$\underline{\mathbb{M}} := \begin{pmatrix} \underline{\mathbb{M}}_{(-)(-)} & \underline{\mathbb{M}}_{(-)(\sim)} \\ \underline{\mathbb{M}}_{(\sim)(-)} & \underline{\mathbb{M}}_{(\sim)(\sim)} \end{pmatrix}.$$
(5.25)

Die Untermatrizen haben die Darstellungen

$$\underline{\mathbb{M}}_{(\alpha)(\beta)} := \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & \underline{\mathbb{M}}_{(\alpha n)(\beta m)} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \qquad (5.26)$$

welche wiederum aus den Untermatrizen

$$\underline{\mathbb{M}}_{(\alpha n)(\beta m)} := \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & \mathsf{M}_{(\alpha n i)(\beta m j)} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$
(5.27)

zusammengesetzt sind. Auch hier lassen sich die Elemente der $10N \times 10N$ -Matrix M zum einen durch zwei Triple als $M_{(\alpha ni)(\beta mj)}$ und zum anderen durch ihre absoluten Indizes als $M_{\nu\mu}$ dargestellen. Die Bestimmung dieser absoluten Indizes erfolgt analog zur Gleichung (5.23).

Lineares Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten

Auf dieselbe Art lassen sich jetzt auch die Matrix $\underline{\mathbb{J}}$ und der Vektor \mathbb{P} aus den in (5.19) beschriebenen Komponenten definieren, wodurch das Gleichungssystem (5.18) folgende kompakte Form erhält

$$\left(\mathbb{J}\,\partial_t + \underline{\mathbb{M}}\,\right)\mathbb{X} = \mathbb{P}\,.\tag{5.28}$$

Multipliziert man diese Gleichung mit der zu $\underline{\mathbb{J}}$ inversen Matrix, so erhält man schließlich die für die weiteren Überlegungen zentrale Gleichung:

$$\left(\underline{\mathbb{I}}\,\partial_t + \underline{\mathbb{L}}\,(\boldsymbol{\kappa})\right) \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa}, t) = \mathbb{F}(\boldsymbol{\kappa}, t)\,,\tag{5.29}$$

 mit

$$\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa}) = \underline{\mathbb{J}}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}) \underline{\mathbb{M}}(\boldsymbol{\kappa}) \quad \text{und} \\ \mathbb{F}(\boldsymbol{\kappa}) = \underline{\mathbb{J}}^{-1}(\boldsymbol{\kappa}) \mathbb{P}(\boldsymbol{\kappa}), \quad (5.30)$$

sowie der $10N \times 10N$ -dimensionalen Einheitsmatrix $\underline{\mathbb{I}}$.

Korrelationsmatrix der Fluktuationen

Die Korrelationsmatrix der Fluktuationen hat mit der Darstellung (5.24) die Gestalt

$$S_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', y, y', t, t') = \langle X_i(x, y, z, t) X_j(x', y', z', t') \rangle$$

= $\sum_{\alpha, \beta} \sum_{n, m} \langle \mathsf{X}_{(\alpha n i)}(x, z, t) \mathsf{X}_{(\beta m j)}(x', z', t') \rangle \varphi_{\alpha n}(y) \varphi_{\beta m}(y')$
=: $\sum_{\alpha, \beta} \sum_{n, m} \mathsf{S}_{(\alpha n i)(\beta m j)}(x, x', z, z', t, t') \varphi_{\alpha n}(y) \varphi_{\beta m}(y'),$ (5.31)

wobei die Korrelationen der unterschiedlichen Entwicklungskoeffizienten in den Funktionen $\mathsf{S}_{(\alpha n i)(\beta m j)}(x, x', z, z', t, t')$ zusammengefasst wurden. Schließlich lassen sich diese Elemente, wie zuvor in der Gleichung (5.25) für die Matrix $\underline{\mathbb{M}}$ beschrieben, in der Form einer Matrix $\underline{\mathbb{S}}(x, x', z, z', t, t')$ darstellen und aus dem dyadischen Produkt

$$\underline{\mathbb{S}}(x, x', z, z', t, t') = \langle \mathbb{X}(x, z, t) \mathbb{X}(x', z', t') \rangle$$
(5.32)

ermitteln. Insgesamt erhält man damit die Darstellung der Korrelationsmatrix:

$$\underline{S}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t') = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{n,m} \langle \mathbb{X}_{(\alpha n)}(x,z,t) \mathbb{X}_{(\beta m)}(x',z',t') \rangle \varphi_{\alpha n}(y) \varphi_{\beta m}(y')$$
$$= \sum_{\alpha,\beta} \sum_{n,m} \underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(x,x',z,z',t,t') \varphi_{\alpha n}(y) \varphi_{\beta m}(y').$$
(5.33)

Analoge Summendarstellungen ergeben sich für die von der Frequenz und der Wellenzahl abhängenden Korrelationsmatrizen.

Korrelation der Kräfte

Die Korrelation zweier Entwicklungskoeffizienten der nach Gleichung (5.7) im Vektor **P** zusammengefassten Kräfte ergibt sich analog mit Hilfe von (5.19) aus

$$\left\langle \mathsf{P}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\mathsf{P}(\boldsymbol{\kappa}',\omega')\right\rangle_{(\alpha n i)(\beta m j)} = \left\langle \int_{-d/2}^{d/2} dy \ \varphi_{\alpha n}(y) P_i(\boldsymbol{\kappa},y,\omega) \int_{-d/2}^{d/2} dy' \ \varphi_{\beta m}(y) P_j(\boldsymbol{\kappa}',y',\omega') \right\rangle,$$

woraus nach Vertauschen der Ensemble-Mittelung mit der y-Integration folgt:

$$\langle \mathsf{P}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\mathsf{P}(\boldsymbol{\kappa}',\omega')\rangle_{(\alpha n i)(\beta m j)} = \int_{-d/2}^{d/2} dy \ \varphi_{\alpha n}(y) \int_{-d/2}^{d/2} dy' \ \varphi_{\beta m}(y) \langle P_i(\boldsymbol{\kappa},y,\omega)P_j(\boldsymbol{\kappa}',y',\omega)\rangle.$$

Die Kräfte $P_i(\mathbf{r}, t)$ sind lineare Funktionen des stochastischen Spannungstensors. Somit gilt für ihre Korrelation nach einer Fouriertransformation in x- und z-Richtung, ebenso

wie in der Zeit, nach Anhang (D.2) die Beziehung

$$\langle \mathsf{P}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\mathsf{P}(\boldsymbol{\kappa}',\omega')\rangle_{(\alpha n i)(\beta m j)} =$$

$$2Q^{2}\nu(2\pi)^{3}\delta(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}')\delta(\omega+\omega')\int_{-d/2}^{d/2}dy \ \varphi_{\alpha n}(y)\int_{-d/2}^{d/2}dy' \ \varphi_{\beta m}(y)\mathcal{P}_{ij}(\boldsymbol{\kappa},y,y',\omega)\delta(y-y') \,.$$

$$(5.34)$$

Die Operatoren $\mathcal{P}_{ij}(\kappa, y, y', \omega)$ lassen sich hierbei unmittelbar als Produkte der in den Gleichungen (5.1) auftretenden Funktionen **G** und *H* und unter Berücksichtigung der speziellen Symmetrie des stochastischen Spannungstensors ermitteln. Die Berechnung wurde, ebenso wie die eigentliche Projektion, detailliert im Anhang **D** beschrieben.

Die Koeffizienten (5.34) der Kraftkorrelationen lassen sich wieder in einer Matrix zusammenfassen und nach beidseitiger Multiplikation dieser Matrix mit der Inversen Matrix von $\mathbb{J}(\kappa)$ folgt für die Korrelationsmatrix der Koeffizienten des Vektors $\mathbb{F}(\kappa)$ aus (5.30) die folgende Struktur.

$$\langle \mathbb{F}_i(\boldsymbol{\kappa}, \omega) \mathbb{F}_j(\boldsymbol{\kappa}', \omega') \rangle =: (2\pi)^3 \mathbb{K}_{ij} \delta(\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}') \delta(\omega + \omega')$$
(5.35)

Die Berechnung der Elemente der hierdurch definierten Matrix $\underline{\mathbb{K}}$ erfolgt für eine spezielle Wahl der Entwicklungsfunktionen in Kapitel 5.4.

5.2 Symmetrie

In diesem Abschnitt wird untersucht, wie sich die Randbedingungen an den Wänden auf die Symmetrie der Korrelationsmatrix $S_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ und insbesondere auf die Korrelationen unter den verschiedenen Entwicklungskoeffizienten, also auf die in (5.32) definierte Matrix \underline{S} auswirkt.

Da die stationäre Scherströmung an einem bestimmten Ort zu unterschiedlichen Zeiten vollkommen gleich ist, bleibt die Translationsinvarianz in der Zeit unberührt. Gleichzeitig wird das System homogen und unendlich ausgedehnt in x- und z-Richtung angenommen, wodurch eine räumliche Translationsinvarianz und Reflexionssymmetrie entlang dieser beiden Koordinatenrichtungen vorliegt. Senkrecht zu den begrenzenden Wänden in y-Richtung gilt dies jedoch nicht mehr.

Die Korrelation zweier kommutierender Größen, wie es die skalaren Geschwindigkeiten sind, ändert sich nach Vertauschung dieser nicht, so dass

$$S_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', y, y', t, t') = \langle X_j(x', y', z', t') X_i(x, y, z, t) \rangle = S_{ji}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, y, y', t', t)$$
(5.36)

gelten muss. Aufgrund der Translationsinvarianz in x- und z-Richtung sowie in der Zeit, kann man sie durch die Verschiebungen -x', -z' und -t' außerdem als Funktion des

jeweiligen Abstandes $\bar{x} = x - x', \ \bar{z} = z - z'$ und $\bar{t} = t - t'$ umschreiben

$$S_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', y, y', t, t') = \langle X_i(x - x', y, z - z', t - t') X_j(0, y', 0, 0) \rangle$$

= $S_{ij}(\bar{x}, y, y', \bar{z}, \bar{t})$. (5.37)

Kombiniert man die beiden Eigenschaften (5.36) und (5.37), so ergibt sich die folgende Symmetriebeziehung

$$S_{ij}(\bar{x}, y, y', \bar{z}, \bar{t}) = \langle X_j(x' - x, y', z' - z, t' - t) X_i(0, y, 0, 0) \rangle = S_{ji}(-\bar{x}, y', y, -\bar{z}, -\bar{t}).$$
(5.38)

Setzt man in diesen Ausdruck die Entwicklung (5.31) ein, so erhält man

$$S_{ij}(\bar{x}, y, y', \bar{z}, \bar{t}) = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{n, m} \mathsf{S}_{(\alpha n i)(\beta m j)}(\bar{x}, \bar{z}, \bar{t})\varphi_{\alpha n}(y)\varphi_{\beta m}(y')$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{n, m} \mathsf{S}_{(\alpha n j)(\beta m i)}(-\bar{x}, -\bar{z}, -\bar{t})\varphi_{\alpha n}(y')\varphi_{\beta m}(y)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{n, m} \mathsf{S}_{(\alpha n j)(\beta m i)}(-\bar{x}, -\bar{z}, -\bar{t})\varphi_{\beta m}(y)\varphi_{\alpha n}(y')$$

$$= \sum_{\beta, \alpha} \sum_{m, n} \mathsf{S}_{(\beta m j)(\alpha n i)}(-\bar{x}, -\bar{z}, -\bar{t})\varphi_{\alpha n}(y)\varphi_{\beta m}(y'),$$

wobei in der letzten Zeile die Indizes $n \leftrightarrow m$ und $\alpha \leftrightarrow \beta$ vertauscht wurden. Dies ist deshalb möglich, da über beide Indizes summiert wird. Vergleicht man hier die Summanden in der ersten mit denen in der letzten Zeile, so ergibt sich die Symmetriebeziehung

$$\mathsf{S}_{(\alpha n i)(\beta m j)}(\bar{x}, \bar{z}, \bar{t}) = \mathsf{S}_{(\beta m j)(\alpha n i)}(-\bar{x}, -\bar{z}, -\bar{t})$$
(5.39)

für die Elemente der Korrelationsmatrix. Eine Orts- und Zeitumkehr hat also ein paarweises Vertauschen aller Indizes der Koeffizienten $S_{(\alpha ni)(\beta mj)}$ zur Folge.

Fasst man diese Korrelationskoeffizienten mit Hilfe der Darstellung (5.25) - (5.27) in einer Koeffizientenmatrix

$$\mathbb{S}(x, x', z, z', t, t') = \mathbb{S}(\bar{x}, \bar{z}, \bar{t}) = \langle \mathbb{X}(\bar{x}, \bar{z}, \bar{t}) \mathbb{X}(0, 0, 0) \rangle$$
(5.40)

zusammen, so folgt aus (5.39) die Beziehung

$$\underline{\mathbb{S}}(x,z,t) = \underline{\mathbb{S}}^{T}(-x,-z,-t).$$
(5.41)

Unter Verwendung der Translationssymmetrie kann man die Fouriertransformierte $\mathbb{S}(\kappa, \kappa', \omega, \omega')$ der Korrelationsmatrix $\mathbb{S}(x, x', z, z', t, t')$ durch die Relation

$$\mathbb{S}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}', \omega, \omega') = (2\pi)^3 \mathbb{S}(\boldsymbol{\kappa}, \omega) \delta(\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}') \delta(\omega + \omega')$$
(5.42)

ausdrücken, womit die spektrale Dichte

$$\mathbb{S}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \int d\bar{x} \ d\bar{z} \ d\bar{t} \ \mathbb{S}(\bar{x},\bar{z},\bar{t})e^{i\omega\bar{t}-i\kappa_x\bar{x}-i\kappa_z\bar{z}}$$
(5.43)

eingeführt wurde. Diese hat wegen der Beziehung (5.41) die Eigenschaft

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \int dx \, dz \, dt \, \underline{\mathbb{S}}(x,z,t) e^{i\omega t - i\kappa_x x - i\kappa_z z}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, dz \, dt \, \underline{\mathbb{S}}^T(-x,-z,-t) e^{i\omega t - i\kappa_x x - i\kappa_z z}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (-dx) \, (-dz) \, (-dt) \, \underline{\mathbb{S}}^T(x,z,t) e^{-i\omega t + i\kappa_x x + i\kappa_z z}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \, dz \, dt \, \underline{\mathbb{S}}^T(x,z,t) e^{-i\omega t + i\kappa_x x + i\kappa_z z}$$

$$= \underline{\mathbb{S}}^T(-\boldsymbol{\kappa},-\omega),$$

das heißt die Korrelationsmatrix ist selbstadjungiert:

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathbb{S}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega).$$
(5.44)

Durch diese zentrale Beziehung wird die Symmetrie des Systems ausgedrückt.

5.3 Spektrale Dichte

In diesem Abschnitt werden die spektrale Dichte und die zeitabhängige Korrelationsmatrix formal aus den Bewegungsgleichungen (5.1) bestimmt. Wie zuvor im Abschnitt 3.2 am Beispiel eines unendlich ausgedehnten Gefäßes gezeigt, benötigt man für die dynamische Korrelation die statische, also zeitgleiche Korrelationsmatrix, die im Allgemeinen im Rahmen der Fluktuations-Dissipation Theorie aus der statischen Suszeptibilität abgeleitet werden kann, wie es im Anhang B ausgeführt ist.

Auch hier soll in Abschnitt 5.3.1 zunächst der gleiche Formalismus wie in den Abschnitten 3.2 und 4.6 angewendet und die dynamische Suszeptibilität bis auf die Kenntnis der statischen Korrelation zurückgeführt werden. Letztere können aufgrund des durch die externe Strömung verursachten Nichtgleichgewichts jedoch nicht unter der Annahme globalen thermischen Gleichgewichts durch das Fluktuations-Dissipations Theorem berechnet werden. Stattdessen benutzt man unter der Vorraussetzung eines lokalen thermischen Gleichgewichts der ruhenden, unendlich ausgedehnten Flüssigkeit bekannten stochastischen Spannungstensor.

5.3.1 Spektrale Dichte aus der statischen Korrelation

An dieser Stelle soll in gleicher Weise wie in Abschnitt 3.2 für den Fall einer unendlich ausgedehnten Flüssigkeit verfahren und der Mittelwert der Gleichungen (5.29) über die stochastischen Kraftdichten [58] berechnet werden. Da letztere bei der Mittelung verschwinden, $\langle \mathbb{F} \rangle = 0$, erhält man eine Gleichung, die die Relaxation einer Nichtgleichgewichtsauslenkung $\mathbb{X}(t=0)$ zurück ins Gleichgewicht beschreibt. Eine Laplace-Transformation der resultierenden Differentialgleichung liefert daher das Gleichungssystem

$$\left(-is\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right) \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa}, s) = \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0)$$
(5.45)

mit der formalen Lösung

$$\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},s) = \left(-is\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1} \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t=0) =: \underline{\mathbb{R}}(\boldsymbol{\kappa},s) \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t=0).$$
(5.46)

Dies entspricht aber gerade der Laplace-Transformierten eines Propagators in der Zeit, so dass mit Hilfe von (C.15) die rücktransformierten Gleichungen in der Zeitdarstellung formal

$$\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t) = e^{-\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})t} \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t=0) =: \underline{\mathbb{R}}(\boldsymbol{\kappa},t) \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t=0)$$
(5.47)

lauten. Die Matrix $\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})$ kann man auf die Form $\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa}) = \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa}) + g\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})$ bringen, wobei die Matrix $\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})$ den Fall ohne externen Fluss (g = 0) beschreibt. Möchte man diesen Fall von der Relaxationsfunktion $\underline{\mathbb{R}}(\boldsymbol{\kappa}, s)$ abspalten, kann man mit Hilfe der Dyson-Zerlegung

$$\underline{\mathbb{R}}(\boldsymbol{\kappa},s) = \left(-iz\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}$$

$$-g\left(-iz\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})\left(-iz\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa}) + g\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}$$
(5.48)

die Lösung auch in der Form

$$\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t) = \left(e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})t} - g\int_0^t dt' \ e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})t'}\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})e^{-(\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa}) + g\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa}))(t-t')}\right) \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t=0)$$
(5.49)

exakt darstellen. Ist man insbesondere nur an der linearen Ordnung in g interessiert, ergibt sich als Approximation von (5.49) die Gleichung

$$\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t) = \left(e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})t} - g\int_0^t dt' \ e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})t'}\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})(t-t')}\right)\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},t=0).$$
(5.50)

Multipliziert man aber die Gleichung (5.46) dyadisch mit dem Zustand $\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0)$ zum Zeitpunkt t = 0 und führt eine Gleichgewichtsmittelung durch [58, 59], so erhält man die Lösung für die Laplace-Transformierte Korrelationsmatrix $\underline{S}(\boldsymbol{\kappa}, s)$, sofern man die Anfangskorrelation $\underline{S}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0)$ kennt:

$$\underline{\tilde{\mathbb{S}}}(\boldsymbol{\kappa},s) = \underline{\mathbb{R}}(\boldsymbol{\kappa},s)\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t=0).$$
(5.51)

 $\underline{\mathbb{R}}(\kappa, s)$ ist weiterhin gegeben durch (5.47). Die spektrale Dichte ergibt sich dann, wie in (3.15) gezeigt, aus

$$\underline{\underline{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\underline{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \underline{\underline{S}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega)$$
$$= \underline{\underline{R}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\underline{S}}(\boldsymbol{\kappa},t=0) + \underline{\underline{S}}^{T}(-\boldsymbol{\kappa},t=0)\underline{\underline{R}}^{T}(-\boldsymbol{\kappa},-\omega), \qquad (5.52)$$

und eine Rücktransformation in der Zeit liefert

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t) = \underline{\mathbb{R}}(\boldsymbol{\kappa},t)\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t=0) + \underline{\mathbb{S}}^{T}(-\boldsymbol{\kappa},t=0)\underline{\mathbb{R}}^{T}(-\boldsymbol{\kappa},-t).$$
(5.53)

5.3.2 Spektrale Dichte aus dem hydrodynamischen Spannungstensor

Im Gegensatz zur unendlich ausgedehnten und ruhenden Flüssigkeit kann man im vorliegenden Fall die Anfangskorrelation $\underline{S}(\kappa, t = 0)$ aus Gleichung (5.33) nicht aus thermodynamischen Überlegungen ableiten, da weder der Einfluss der Wände, noch derjenige des Scherflusses auf die statische Suszeptibilität bekannt sind. Mit der Annahme, dass auch im Scherfluss lokales thermodynamisches Gleichgewicht herrscht, fordert man die Gültigkeit des Fluktuations-Dissipations Theorems für die Fluktuationen des Spannungstensors, womit die Fluktuationsstärke bekannt ist.³

Da vom stochastischen Spannungstensor nur die Korrelationen selbst bekannt sind, wird die Projektion auf die Entwicklungsfunktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ vorerst auch nur formal durchgeführt. Die eigentliche Berechnung wird erst zur Ermittlung der Korrelation der Kräfte, also nach Wahl der speziellen Entwicklungsfunktionen, wie zuvor in Kapitel 5.1.5 beschrieben, ausgeführt.

Nach der zeitlichen Fouriertransformation der Gleichungen (5.29) werden die Fluktuationen der Felder durch die Gleichung

$$\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \left(-i\omega\mathbb{I} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\mathbb{F}(\boldsymbol{\kappa},\omega)$$
(5.54)

bestimmt. Die daraus berechnete Korrelationsfunktion ergibt

$$\langle \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\mathbb{X}^{T}(\boldsymbol{\kappa}',\omega')\rangle = \langle \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\mathbb{F}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\mathbb{F}^{T}(\omega',\boldsymbol{\kappa}')\left(-i\omega'\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa}')\right)^{-T} \\ = (2\pi)^{3}\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\underline{\mathbb{K}}(\boldsymbol{\kappa})\left(i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(-\boldsymbol{\kappa})\right)^{-T}\delta(\omega+\omega')\delta(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}'),$$

wobei die Eigenschaft $\langle \mathbb{F}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\mathbb{F}^{T}(\omega',\boldsymbol{\kappa}')\rangle = (2\pi)^{3}\underline{\mathbb{K}}(\boldsymbol{\kappa})\delta(\omega+\omega')\delta(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}')$ aus Gleichung (5.35) benutzt wurde. Ein Vergleich mit (5.42) liefert die spektralen Dichte

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\underline{\mathbb{K}}(\boldsymbol{\kappa})\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-\dagger}.$$
 (5.55)

Symmetrisieren

Aus der in (5.44) abgeleiteten Eigenschaft von $\underline{\mathbb{S}}(\kappa, \omega)$ folgt, dass auch $\underline{\mathbb{K}}(\kappa)$ selbstadjungiert sein muss:

$$\underline{\mathbb{K}}(\boldsymbol{\kappa}) = \underline{\mathbb{K}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa}) \tag{5.56}$$

³ Die Fluktuationen des Spannungstensors bestimmen die fluktuierende Kraft F und somit die Stärke der Dichte- und Geschwindigkeitsfluktuationen X. Es erweist sich wieder als praktisch F in seine longitudinalen und transversalen Anteile zu zerlegen.

Durch die später im Abschnitt 5.4 durchgeführte Entwicklung nach einem speziellen Funktionensystem geht diese Eigenschaft jedoch verloren, so dass hier eine symmetrisierte Fassung der Kraft (wie es auch Beispielsweise in der Quantenstatistik [62, Kap. 4] üblich ist) eingeführt wird, die eine korrekte Symmetrie garantiert:

$$\underline{\mathbb{K}}_{S}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{K}}(\boldsymbol{\kappa}) + \underline{\mathbb{K}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa}) \right).$$
(5.57)

Zeitdarstellung

Eine Rücktransformation der spektralen Dichte (5.55) in der Zeit ergibt die Darstellung durch folgendes Faltungsintegral

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\tau} \Theta(\tau) \underline{\mathbb{K}}_{S}(\boldsymbol{\kappa}) e^{\underline{\mathbb{L}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa})(t-\tau)} \Theta(-(t-\tau))$$
$$= \int_{\max(0,t)}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\tau} \underline{\mathbb{K}}_{S}(\boldsymbol{\kappa}) e^{\underline{\mathbb{L}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa})(t-\tau)} .$$

Die Lösung dieses Integrals wird im Anhang C.3 beschrieben, und ist gegeben durch

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t) = e^{-\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})t}\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t=0)\Theta(t) + \underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t=0)e^{\underline{\mathbb{L}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa})t}\Theta(-t).$$
(5.58)

Zur exakten Berechnung der Zeitabhängigkeit von $\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ werden die Eigenwerte von $\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})$ benötigt. Diese Matrix $\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})$ kann, auch wenn nur wenige Entwicklungskoeffizienten berücksichtigt werden, sehr groß werden und besitzt außerdem viele nichtdiagonale Beiträge. Die Berechnung von Eigenwerten und Vektoren ist daher im Allgemeinen nicht analytisch möglich, wie es für eine exakte Lösung bezüglich der Scherratenabhängigkeit nötig wäre. Das gleiche gilt für die Rücktransformation in den Ortsraum.

Daher soll im Folgenden eine Entwicklung bis zur quadratischen Ordnung in g durchgeführt werden. Hierzu wird der Opertor $\underline{\mathbb{L}}(\kappa)$ in einen Anteil für die ruhende Flüssigkeit $\underline{\mathbb{A}}(\kappa)$ und den durch die Strömung verursachten und somit von der Scherrate g abhängigen Anteil $g\underline{\mathbb{B}}(\kappa)$ zerlegt:

$$\underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa}) = \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa}) + g\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa}).$$
(5.59)

Um die spektrale Dichte nach Gleichung (5.55) darzustellen, benötigt man jetzt die zu $(-i\omega \underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\kappa))$ inverse Matrix, welche mit Hilfe einer Dyson-Zerlegung wie folgt bis zur zweiten Ordnung in g dargestellt werden kann:⁴

$$\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1} = \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa}) + g\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}$$
(5.60)
$$= \left[\underline{\mathbb{I}} - g\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\right)^{-1}\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa}) + g^{2}\left(\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}\right)^{-1}\underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{2} + \mathcal{O}(g^{3})\right] \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}.$$

⁴ Die Zerlegung (5.63) kann man auch bis zu beliebiger Ordnung ν in g schreiben als:

$$\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa}) + g\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (-g)^{\nu} \left[\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right]^{\nu} \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}$$

Die spektrale Dichte in einer deterministisch ruhenden Flüssigkeit, $\underline{\mathbb{S}}_0(\kappa)$, ergibt sich für g = 0 und es gilt in diesem Fall nach (5.59) die Identität $\underline{\mathbb{L}}(\kappa) = \underline{\mathbb{A}}(\kappa)$. In Gleichung (5.55) eingesetzt erhält man

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega) := \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\underline{\mathbb{K}}_{S}(\boldsymbol{\kappa})\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-\dagger}.$$
(5.61)

Führt man außerdem den frequenzabhängigen Operator

$$\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) := \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1} \underline{\mathbb{B}}(\boldsymbol{\kappa})$$
(5.62)

ein, so kann man (5.60) vereinfacht schreiben als

$$\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}$$

$$= \left[\underline{\mathbb{I}} - g\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + g^2\left(\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^2 + \mathcal{O}(g^3)\right] \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}$$

$$(5.63)$$

und nach Einsetzen in Gleichung (5.55) ist die strömungsabhängige spektrale Dichte gegeben durch 5

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \left[\underline{\mathbb{I}} - g\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + g^2 \left(\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^2 + \mathcal{O}(g^3)\right] \underline{\mathbb{S}}_0(\boldsymbol{\kappa},\omega) \times \left[\underline{\mathbb{I}} - g\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + g^2 \left(\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^2 + \mathcal{O}(g^3)\right].$$

Mit $\underline{\mathbb{S}}_0(\boldsymbol{\kappa})$ aus (5.61) und den Abkürzungen

$$\underline{\underline{S}}_{1}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = -\left[\underline{\underline{\mathcal{B}}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\underline{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \underline{\underline{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\underline{\mathcal{B}}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right], \qquad (5.64a)$$

$$\underline{\underline{S}}_{2}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \left[\underline{\underline{\mathcal{B}}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\underline{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\underline{\mathcal{B}}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \left(\underline{\underline{\mathcal{B}}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^{2}\underline{\underline{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \underline{\underline{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\left(\underline{\underline{\mathcal{B}}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^{2}\right] \qquad (5.64b)$$

erhält man schließlich die zu (4.41) analoge Darstellung

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + g\underline{\mathbb{S}}_{1}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + g^{2}\underline{\mathbb{S}}_{2}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \mathcal{O}(g^{3}).$$
(5.65)

$$\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\infty} (-g)^{\nu+\mu} \Big[\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\Big]^{\nu} \underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega) \Big[\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\Big]^{\mu} .$$

 $^{^5\}mathrm{Im}$ Fall beliebiger Ordnung in gergibt sich für die spektrale Dichte

5.4 Haftende Randbedingungen und Inkompressibilität

Das bisher allgemein gehaltene Schema wird in diesem Abschnitt für eine inkompressible Flüssigkeit mit einem System harmonischer Funktionen, welche die schlupffreien Randbedingungen erfüllen, numerisch ausgewertet [64]. Im darauf folgenden Abschnitt 5.5 wird kurz skizziert, wie die kompressiblen Beiträge eingehen.

Liegt Inkompressibilität vor, so reduzieren sich die relevanten Bewegungsgleichungen (4.3) auf die drei Gleichungen für die transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen und entsprechend muss von den Matrixoperatoren (5.8) - (5.10) nur die rechte untere 3×3 -Matrix berücksichtigt werden.

Da die Funktionen bezüglich y nach Funktionensystemen entwickelt werden, liegt in diesem Abschnitt der Vektor \mathbf{r} stets in der xz-Ebene, es gilt also $\mathbf{r} = (r_x, 0, r_z)$. Bei der Geschwindigkeit \mathbf{v} handelt es sich, falls nicht explizit angegeben, um den zuvor mit \mathbf{v}^t gekennzeichneten transversalen Geschwindigkeitsbeitrag.

5.4.1 Funktionensystem

Schlupffreie Randbedingungen

Es wird nun ein einfaches System mit harmonischen Funktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ gewählt, das die schlupffreien Randbedingungen $\mathbf{v}(\pm \frac{d}{2}) = 0$ erfüllt und die folgende Rechnung überschaubar hält:

$$\varphi_{-k}(y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \cos(K_{-k} y) \qquad \text{mit } K_{-k} = \frac{(2k-1)\pi}{d}, \qquad (5.66a)$$

$$\varphi_{\sim k}(y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin(K_{\sim k} y) \qquad \text{mit } K_{\sim k} = \frac{2k\pi}{d}.$$
(5.66b)

Bezüglich des Skalarproduktes in Gleichung (5.15) sind diese harmonischen Basisfunktionen zueinander orthogonal:

$$\langle \varphi_{\alpha n}(y), \varphi_{\beta l}(y) \rangle_d = \delta_{nl} \delta_{\alpha \beta} \,.$$
 (5.67)

Die Geschwindigkeiten haben in dem so gewählten System die Darstellung

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, y, t) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sum_{n} \mathbf{v}_{-n}(\mathbf{r}, t) \cos(K_{-n}y) + \mathbf{v}_{\sim n}(\mathbf{r}, t) \sin(K_{\sim n}y)$$
(5.68)

und erfüllen nach Konstruktion immer die Randbedingung $\mathbf{v}(\mathbf{r}, y = \pm \frac{d}{2}, t) = 0$. Die erste und dritte symmetrische und die erste antisymmetrische Entwicklungsfunktionen sind in der Abbildung 5.2 dargestellt und werden dort mit den Chandrasekhar-Funktionen [63] im Falle inkompressibler Flüssigkeiten verglichen.



Abb. 5.2: In der linken Abbildung ist je die erste symmetrische und antisymmetrische Entwicklungsfunktion $\varphi_{-1}(y)$ (schwarze, durchgezogenen Linie) beziehungsweise $\varphi_{\sim 1}(y)$ (rote, durchgezogenen Linie) im Vergleich zu den entsprechenden Chandrasekhar-Funktionen [63] (gestrichelte Linien) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Chandrasekhar-Funktionen für die niedrigste Modenzahl im Zentrum (absolut) größere Werte und am Rand kleinere Werte annehmen. Im rechten Bild handelt es sich um die dritte symmetrische Mode $\varphi_{-3}(y)$ (durchgezogenen Linie) im Vergleich zur entsprechenden Chandrasekhar-Funktion (gestrichelte Linien). Hier ist zu erkennen, dass schon mit der dritten Mode zwischen den Entwicklungsfunktionen $\varphi(y)$ und den Chandrasekhar-Funktionen im Zentrum kaum mehr ein Unterschied besteht [65].

Inkompressibilität

Da die Geschwindigkeitskomponenten parallel zu den Wänden, v_x und v_z , für feste Randbedingungen an der Oberfläche verschwinden, führt die angenommene Translationsinvarianz in x und z Richtung dazu, dass deren partiellen Ableitungen $\partial_x v_x = \partial_z v_z = 0$ ebenfalls an den Wänden bei $y = \pm \frac{d}{2}$ verschwinden. In diesem Fall liefert die Inkompressibilitätsbedingungen $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ noch folgende zusätzliche Randbedingung: $\partial_y v_y = 0$. Diese letzte Bedingung wird durch den hier verwendeten Funktionensatz (5.66) nicht mehr exakt erfüllt. Mit der Entwicklung der v_y -Komponenente nach sogenannten Chandrasekhar-Funktionen⁶ [63] wäre diese Randbedingung ebenfalls erfüllbar, aber die komplexen Rechnungen wären auch mit Computeralgebra noch wesentlich schwieriger.

Die Darstellung der Ableitung $\partial_y v_y(\mathbf{r}, y, t)$ ist zusammen mit (5.68) gerade gleich

$$\partial_y v_y(\mathbf{r}, y, t) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sum_n -v_{y,-n}(\mathbf{r}, y, t) K_{-n} \sin(K_{-n}y) + v_{y,\sim n}(\mathbf{r}, y, t) K_{\sim n} \cos(K_{\sim n}y) + v_{y,\sim n}(\mathbf{r}, y, t) K_{\sim n}$$

und mit den Randwerten sin $\left(\pm \frac{d}{2}K_{-n}\right) = \mp (-1)^n$ und $\cos\left(\pm \frac{d}{2}K_{\sim n}\right) = (-1)^n$ folgt damit

$$\partial_y v_y(\mathbf{r}, y = \pm \frac{d}{2}) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sum_n (-1)^n \left(\pm v_{y,-n}(\mathbf{r}, y, t) K_{-n} + v_{y,-n}(\mathbf{r}, y, t) K_{-n} \right).$$

Die Wahl $v_{y,\sim n}(\mathbf{r}, y, t) = \frac{K_{-n}}{K_{\sim n}} v_{y,-n}(\mathbf{r}, y, t)$ würde also die Rand- und Inkompressibilitätsbedingung an der Wand bei $y = -\frac{d}{2}$ erfüllen, jedoch gerade nicht jene an der gegenüberliegenden Wand, bei $y = +\frac{d}{2}$. Das durch die Gleichungen (5.66) gewählte Funktionensystems verhindert also, dass die Inkompressibilitätsbedingung gleichzeitig an beiden Wänden erfüllt werden kann und löst das Randwertproblem somit nur näherungsweise. Für die qualitativen Trends der Resultate in dieser Arbeit ist dies nicht entscheidend, die Kopplungseffekte von symmetrischen und antisymmetrischen Funktionen sind hierbei zentraler.

$$c_{-n}(y) = \cosh(\lambda_n y) / \cosh\left(\frac{\lambda_n}{2}\right) - \cos(\lambda_n y) / \cos\left(\frac{\lambda_n}{2}\right)$$
$$c_{\sim n}(y) = \sinh(\lambda_n y) / \sinh\left(\frac{\lambda_n}{2}\right) - \sin(\lambda_n y) / \sin\left(\frac{\lambda_n}{2}\right),$$

wobei sich die λ_n aus der Bedingung $c_{-n}(y = \pm 1/2) = c_{\sim n}(y = \pm 1/2) = 0$ und $\frac{d}{dy}c_{-n}(y = \pm 1/2) = \frac{d}{dy}c_{\sim n}(y = \pm 1/2) = 0$ bestimmen lassen.

⁶Wählt man die Chadrasekhar-Funktionen für die Entwicklung der *y*-Komponente der Geschwindigkeit, $v_y(y)$, so verschwindet auch die erste Ableitung von v_y nach y am Rand, und die Inkompressibilität kann überall erfüllt werden. Die Chandrasekhar-Funktionen lauten, falls sich die Wände an den Stellen $\pm \frac{1}{2}$ befinden:

5.4.2 Bewegungsgleichungen für die transversalen Geschwindigkeiten

Die Bewegungsgleichungen für die transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen in Gleichung (5.12), zusammen mit den rechten, unteren 3×3 -Untermatrizen der Matrixoperatoren in den Gleichungen (5.8)-(5.10), werden jetzt, wie in Abschnitt 5.1.4 beschrieben, durch das Funktionensystem (5.66) in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung in der Zeit für die Entwicklungskoeffizienten transformiert.

Mit Hilfe der im Anhang E.2 eingeführten Koeffizienten und den Definitionen in den Gleichungen (5.30) erhält man für das jetzt gewählte Funktionensystem eine Darstellung der Matrix $\underline{\mathbb{L}}(\kappa) = \underline{\mathbb{A}}(\kappa) + g\underline{\mathbb{B}}(\kappa)$. Für die Matrix $\underline{\mathbb{A}}(\kappa)$, welche die Fluktuationen in einer im Mittel ruhenden Flüssigkeit beschreibt, gilt

$$\underline{\mathbb{A}}_{(\alpha n)(\beta l)} = \nu M_{\alpha n}^2 \delta_{\alpha \beta} \delta_{n l} \underline{I}$$
(5.69)

mit der 3×3 Einheitsmatrix <u>I</u> und dem Quadrat der Wellenzahl $M_{\alpha n}^2 = \kappa^2 + K_{\alpha n}^2$. Sie ist die diskrete Variante der in der analytischen Rechnung im Abschnitt 4.2 unter (4.9) eingeführten Matrix <u>A</u>(**k**) und besitzt die gleiche Struktur. Die Matrix <u>B</u>(κ), welche die Strömungsabhängigkeit des Operators <u>L</u>(κ) und damit der Bewegungsgleichungen für die Fluktuationen (5.29) beschreibt, ist gegeben durch die drei Untermatrizen

$$\underline{\mathbb{B}}_{(\alpha n)(\alpha l)} = \delta_{nl} \begin{pmatrix} 0 & \left(1 - 2\frac{\kappa_x^2}{M_{\alpha n}^2}\right) & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & -2\frac{\kappa_x \kappa_z}{M_{\alpha n}^2} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (5.70a)$$

$$\underline{\mathbb{B}}_{(-n)(\sim l)} = \frac{8}{d} (-1)^{n+l} i \kappa_x \frac{K_{-n} K_{\sim l}}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & \frac{M_{\sim l}^2}{M_{-n}^2} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$
(5.70b)

$$\underline{\mathbb{B}}_{(\sim n)(-l)} = \frac{8}{d} (-1)^{n+l} i \kappa_x \frac{K_{\sim n} K_{-l}}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & \frac{M_{-l}^2}{M_{\sim n}^2} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$
(5.70c)

die, wie in Abschnitt 5.1.5 beschrieben, zu einer Matrix $\underline{\mathbb{B}}$ zusammengesetzt werden. Ein Vergleich mit der Matrix \underline{B} , die in der analytischen Rechung durch Gleichung (4.10) definiert wurde, zeigt, dass die Untermatrizen (5.70a) strukturell mit \underline{B} übereinstimmen. Die in den Koordinaten diagonalen Anteile (5.70b) und (5.70c) wurden hingegen in der analytischen Rechnung in Abschnitt 4.2 im Rahmen einer Näherung vernachlässigt. Sie koppeln die symmetrischen und antisymmetrischen Entwicklungskoeffizienten.

Darstellung der Korrelationsmatrix

Die Korrelationsmatrix $\underline{S}(y, y')$ der Geschwindigkeitsfluktuationen lässt sich mit Hilfe der allgemeinen Gleichung (5.33) durch die Matrix der Entwicklungskoeffizienten $\underline{\mathbb{S}}(y, y')$ ausdrücken. Mit dem speziellen Funktionensystem aus den Gleichungen (5.66) gilt

$$\underline{S}(y,y') = \frac{2}{d} \sum_{n,m} \left(\underline{\mathbb{S}}_{(-n)(-m)} \cos(K_{-n}y) \cos(K_{-m}y') + \underline{\mathbb{S}}_{(\sim n)(\sim m)} \sin(K_{\sim n}y) \sin(K_{\sim m}y') + \underline{\mathbb{S}}_{(-n)(\sim m)} \cos(K_{-n}y) \sin(K_{\sim m}y') + \underline{\mathbb{S}}_{(\sim n)(-m)} \sin(K_{\sim n}y) \cos(K_{-m}y') \right).$$
(5.71)

Für den Spezialfall y = y' = 0 verschwindet der Sinus und es bleibt von Gleichung (5.71) einzig die Summe über alle symmetrischen Moden,

$$\underline{S}(y=0,y'=0) = \frac{2}{d} \sum_{n,m} \underline{\mathbb{S}}_{(-n)(-m)}.$$
(5.72)

Da die Darstellungen (5.71) und (5.72) unabhängig von den weiteren Funktionsparametern sind, wurden diese hier vernachlässigt

Korrelation der Kräfte

Die Berechnung der Kraftkorrelationen ist im Anhang D zu finden. Die symmetrisierte Version der Kraftkorrelation $\underline{\mathbb{K}}_{S}(\kappa)$ erhält man aus den Komponenten der in Abschnitt E.2.1 angegebenen Matrizen $\underline{\mathbb{K}}(\kappa)$ mit Hilfe der Gleichung (5.57):

$$\mathsf{K}_{S,(\alpha n i)(\beta m j)}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \Big(\mathsf{K}_{(\alpha n i)(\beta m j)}(\boldsymbol{\kappa}) + \mathsf{K}^*_{(\beta m j)(\alpha n i)}(\boldsymbol{\kappa}) \Big) \,. \tag{5.73}$$

Die einzelnen Untermatrizen für den inkompressiblen Fall sind im Folgenden aufgelistet:

$$\mathbb{K}_{S,(\alpha n)(\alpha m)}(\boldsymbol{\kappa}) = 2Q^{2}\nu\delta_{nm} \begin{pmatrix} (M_{-n}^{2} - \kappa_{x}^{2}) & 0 & -\kappa_{x}\kappa_{z} \\ 0 & \kappa^{2} & 0 \\ -\kappa_{x}\kappa_{z} & 0 & (M_{-n}^{2} - \kappa_{z}^{2}) \end{pmatrix}, \\ \mathbb{K}_{S,(-n)(\sim m)}(\boldsymbol{\kappa}) = -\frac{4}{d}Q^{2}\nu(-1)^{n+m}K_{-n}K_{\sim m}\frac{(M_{-n}^{2} + M_{\sim m}^{2})}{M_{-n}^{2}M_{\sim m}^{2}} \begin{pmatrix} 0 & i\kappa_{x} & 0 \\ i\kappa_{x} & 0 & i\kappa_{z} \\ 0 & i\kappa_{z} & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbb{K}_{S,(\sim n)(-m)}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{4}{d}Q^{2}\nu(-1)^{n+m}K_{\sim n}K_{-m}\frac{(M_{\sim n}^{2} + M_{-m}^{2})}{M_{\sim n}^{2}M_{-m}^{2}} \begin{pmatrix} 0 & i\kappa_{x} & 0 \\ i\kappa_{x} & 0 & i\kappa_{z} \\ 0 & i\kappa_{z} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.74)$$

Hiermit können die Korrelationen der Entwicklungskoeffizienten der Geschwindigkeitsfluktuationen aus den Beziehungen (5.61) - (5.65) im Wellenzahlraum bis zur gewünschten Ordnung in der Scherrate g ermittelt werden.

5.4.3 Mittelwert über ein Zylindervolumen

Um ein Maß für die stochastischen Kräfte, die auf ein suspendiertes Teilchen wirken, zu erhalten, soll jetzt analog zu der analytischen Rechnung die Mittelung der Fluktuationen über ein kleines Volumen betrachtet werden. Da die numerischen Berechnungen in Zylinderkoordinaten durchgeführt werden, bietet es sich an, den Mittelwert in einem Zylindervolumen anstatt in einem Kugelvolumen zu berechnen. Man betrachte einen Zylinder mit dem Mittelpunkt \mathbf{r}_0 an der y-Position y_0 , der sich mit der Höhe h zwischen $y_0 \pm \frac{h}{2}$ erstreckt und den Radius a hat. Die kreisförmige Grundfläche des Zylinders ist demnach $A_z = \pi a^2$ und sein Volumen $V_Z = V_Z(a, h) = \pi a^2 h$. Die mittlere Fluktuation $[\mathbf{X}(\mathbf{r}_0, y_0, t)]_{V_Z(a,h)}$ in diesem Zylindervolumen ergibt sich aus der Darstellung für die Fluktuation $\mathbf{X}(\mathbf{r}_0, y_0, t)$ aus Gleichung (5.24) zum Zeitpunkt t wie folgt:

$$\begin{split} \left[\mathbf{X}(\mathbf{r}_{0}, y_{0}, t)\right]_{V_{Z}(a,h)} &:= \frac{1}{V_{Z}} \int_{V_{Z}} dy d\mathbf{r} \, \mathbf{X}(\mathbf{r}_{0} + \mathbf{r}, y_{0} + y, t) \\ &= \frac{1}{A_{z}h} \int_{A_{Z}} d\mathbf{r} \, \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} dy \, \sum_{\alpha, n} \varphi_{\alpha n}(y_{0} + y) \mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0} + \mathbf{r}, t) \\ &= \sum_{\alpha, n} \frac{1}{h} \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} dy \, \varphi_{\alpha n}(y_{0} + y) \frac{1}{A_{Z}} \int_{A_{Z}} d\mathbf{r} \, \mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0} + \mathbf{r}, t) \,. \end{split}$$

Separiert man die Mittelung über die Entwicklungsfunktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$,⁷

$$[\varphi_{\alpha n}(y_0)]_h = \frac{1}{h} \int_{-h/2}^{h/2} dy \,\varphi_{\alpha n}(y+y_0) \,, \tag{5.75}$$

von derjenigen über die Grundfläche des Zylinders,

$$\left[\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_0)\right]_{A_Z} = \frac{1}{A_Z} \int_{A_Z} d\mathbf{r} \,\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t)\,,\tag{5.76}$$

so lässt sich die gesamte Mittelung auch wie folgt darstellen:

$$\left[\mathbf{X}(\mathbf{r}_{0}, y_{0}, t)\right]_{V_{Z}} = \sum_{\alpha, n} \left[\varphi_{\alpha n}(y_{0})\right]_{h} \left[\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0})\right]_{A_{Z}} .$$
(5.77)

Zur Berechnung des Flächenmittels $[\mathbb{X}_{\alpha n}(\mathbf{r}_0)]_{A_Z}$ kann man die Fourierdarstellung von $\mathbb{X}_{\alpha n}(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t)$ einsetzen:

$$\begin{bmatrix} \mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0},t) \end{bmatrix}_{A_{Z}} = \frac{1}{A_{Z}} \int_{A_{Z}} d\mathbf{r} \,\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0}+\mathbf{r},t)$$
$$= \frac{1}{A_{Z}} \int_{A_{Z}} d\mathbf{r} \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^{2}} \,\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\boldsymbol{\kappa},t) e^{i\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}_{0}+\mathbf{r})} \,.$$
(5.78)

⁷ Explizit gilt:

$$[\varphi_{-n}(y_0)]_h = \frac{2}{h} \frac{\sin(K_{-n}\frac{h}{2})}{K_{-n}} \varphi_{-n}(y_0), \qquad \qquad [\varphi_{\sim n}(y_0)]_h = \frac{2}{h} \frac{\sin(K_{\sim n}\frac{h}{2})}{K_{\sim n}} \varphi_{\sim n}(y_0).$$

Verschiebt man die Integration über den ebenen Ortsvektor **r** unter das Integral über den Wellenzahlvektor κ , so ergibt sich mit

$$\int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{0}^{a} dr r e^{i\kappa r \cos(\theta)} = 2A \frac{J_1(a\kappa)}{a\kappa}$$
(5.79)

für die über die Fläche A_Z gemittelten Entwicklungskoeffizienten $\mathbb{X}_{\alpha n}(\mathbf{r}_0, t)$ die Darstellung

$$\left[\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0},t)\right]_{A_{Z}} = 2 \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^{2}} \,\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\boldsymbol{\kappa},t) \frac{J_{1}(a\kappa)}{a\kappa} e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}_{0}} \,, \tag{5.80}$$

wobei $J_n(r)$ die Besselfunktionen erster Gattung beschreiben [66] und $\kappa = |\kappa|$ gilt.

Die Korrelation der über das Volumen gemittelten und damit im Volumen kollektiv stattfindenden Fluktuationen $\mathbf{X}(\mathbf{r}_0, y_0, t)$ am selben Ort \mathbf{r}_0 folgt dann aus

$$\begin{bmatrix} \underline{S}(y_0, t) \end{bmatrix}_{V_Z} := \langle [\mathbf{X}(\mathbf{r}_0, y_0, t)]_{V_Z} [\mathbf{X}(\mathbf{r}_0, y_0, 0)]_{V_Z} \rangle$$

$$= \sum_{\alpha, n} \sum_{\beta, m} [\varphi_{\alpha n}(y_0)]_h [\varphi_{\beta m}(y_0)]_h \langle [\mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_0, t)]_{A_Z} [\mathbb{X}_{(\beta m)}(\mathbf{r}_0, 0)]_{A_Z} \rangle$$

$$= \sum_{\alpha, n} \sum_{\beta, m} [\varphi_{\alpha n}(y_0)]_h [\varphi_{\beta m}(y_0)]_h [[\underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(t)]]_{A_Z}, \qquad (5.81)$$

wobei sich die Mittelwerte der Korrelationskoeffizienten über die Kreisfläche A_Z , unter Ausnutzung von (5.80), wie folgt durch ihre Fouriertransformationen darstellen lassen:

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(t) \end{bmatrix} \end{bmatrix}_{A_{Z}} := \langle \begin{bmatrix} \mathbb{X}_{(\alpha n)}(\mathbf{r}_{0},t) \end{bmatrix}_{A_{Z}} \begin{bmatrix} \mathbb{X}_{(\beta m)}(\mathbf{r}_{0},0) \end{bmatrix}_{A_{Z}} \rangle$$

$$= 4 \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^{2}} \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}'}{(2\pi)^{2}} \langle \mathbb{X}_{(\alpha n)}(\boldsymbol{\kappa},t) \mathbb{X}_{(\beta m)}(\boldsymbol{\kappa}',0) \rangle \frac{J_{1}(a\kappa)J_{1}(a\kappa')}{a^{2}\kappa\kappa'} e^{i(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}')\mathbf{r}_{0}}$$

$$= 4 \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^{2}} \int d\boldsymbol{\kappa}' \underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(\boldsymbol{\kappa},t) \delta(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}') \frac{J_{1}(a\kappa)J_{1}(a\kappa')}{a^{2}\kappa\kappa'} e^{i(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa}')\mathbf{r}_{0}}$$

$$= 4 \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^{2}} \underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(\boldsymbol{\kappa},t) \frac{J_{1}^{2}(a\kappa)}{(a\kappa)^{2}}.$$
(5.82)

In Zylinderkoordinaten mit dem Aziumutalwinkel ϑ nimmt der letzte Ausdruck die Form

$$\left[\left[\underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(t)\right]\right]_{A_{Z}} = \frac{4}{a^{2}} \int_{0}^{\infty} \frac{d(a\kappa)}{2\pi} (a\kappa) \int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(\kappa,\vartheta,t) \frac{J_{1}^{2}(a\kappa)}{(a\kappa)^{2}}$$
(5.83)

an und man erhält nach der Substitution $\kappa = \frac{q}{a}$ insgesamt die Darstellung

$$\left[\left[\underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}(t)\right]\right]_{A_{Z}} = \frac{2}{A_{Z}} \int_{0}^{\infty} dq \int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \underline{\mathbb{S}}_{(\alpha n)(\beta m)}\left(\frac{q}{a},\vartheta,t\right) \frac{J_{1}^{2}(q)}{q} \,. \tag{5.84}$$

5.4.4 Ruhende Flüssigkeit

Der strömungsfreie Anteil der spektralen Dichte aus Gleichung (5.65) ergibt sich für g = 0. Aus Gleichung (5.61) erhält man damit

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-1}\underline{\mathbb{K}}_{S}(\boldsymbol{\kappa})\left(-i\omega\underline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\right)^{-\dagger}.$$
(5.85)

Eine Rücktransformation in der Zeit liefert mit Hilfe von (C.16) das Faltungsintegral

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t) = \int_{\max(0,t)}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\tau} \underline{\mathbb{K}}_{S}(\boldsymbol{\kappa}) e^{\underline{\mathbb{A}}^{\dagger}(\boldsymbol{\kappa})(t-\tau)} \ .$$
(5.86)

Da die Matrix $\underline{\mathbb{A}}(\kappa)$ Diagonalgestalt mit positiven Elementen hat und außerdem rein reell ist, lässt sich die Integration der einzelnen Matrixelemente wie folgt durchführen:⁸

$$S_{0,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa},t) = \int_{\max(0,t)}^{\infty} d\tau \ e^{-\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})\tau} \mathbb{K}_{S,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa}) e^{\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa})(t-\tau)}$$

$$= \int_{\max(0,t)}^{\infty} d\tau \ e^{-(\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})+\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa}))\tau} \mathbb{K}_{S,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa}) e^{\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa})t}$$

$$= -e^{-\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})\max(0,t)} \frac{\mathbb{K}_{S,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa})}{-(\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})+\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa}))} e^{\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa})(t-\max(0,t))}$$

$$= \Theta(t) \frac{e^{-\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})t} \mathbb{K}_{S,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa})}{(\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})+\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa}))} + \Theta(-t) \frac{\mathbb{K}_{S,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa})e^{\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa})t}}{(\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa})+\mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa}))}.$$
(5.87)

Für die statische Korrelation (t = 0) folgt:⁹

$$\underline{\mathbb{S}}_{0,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa},t=0) = \frac{\mathbb{K}_{S,\nu\mu}(\boldsymbol{\kappa})}{\left(\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa}) + \mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa})\right)},$$
(5.89)

womit sich die zeitabhängige Lösung auch auf die folgende Form bringen lässt:

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t) = \Theta(t)e^{-\mathbb{A}(\boldsymbol{\kappa})t}\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t=0) + \Theta(-t)\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t=0)e^{\mathbb{A}(\boldsymbol{\kappa})t}.$$
(5.90)

Dieser Ausdruck stimmt formal mit demjenigen aus (5.53) überein, wobei die Relaxationsfunktion durch $\underline{\mathbb{R}}(\kappa, t) = \Theta(t)e^{-\mathbb{A}(\kappa)t}$ gegeben ist.

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa}, t=0) = -\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \mathbb{K}_{S}(\boldsymbol{\kappa}).$$
(5.88)

Da auch dort die Korrelationen der transversalen Komponenten untereinander nicht von den longitudinalen beeinflusst werden, stimmen hierfür die Ergebnisse in diesem Kapitel mit denjenigen dort überein, und die Darstellung durch den Tensor $\underline{\underline{T}}$ ist für die transversalen Fluktuationen nur eine Abkürzung für den Ausdruck (5.89).

⁸ Die Matrixelemente ν und μ lassen sich wie in der Gleichung (5.23) gezeigt aus der Triple-Darstellung (αni) bestimmen.

⁹ Wenn die Kompressibilität der Flüssigkeit im Abschnitt 5.5 mit berücksichtigt wird, ist <u>A</u> weder diagonal noch rein reell und dieser Ausdruck wird mit einem im Anhang C.3 hergeleiteten vierstufigen Tensor $\underline{T}^{AA^{\dagger}}$ wie folgt dargestellt:



Abb. 5.3: Die Elemente $S_{0;(11x)(11x)}(\boldsymbol{\kappa},t)$ und $S_{0,(11y)(11y)}(\boldsymbol{\kappa},t)$ der Matrix der Entwicklungskoeffizienten $\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t)$ aus Gleichung (5.90) sind als Funktion der Zeit für ein festes $\boldsymbol{\kappa} = \pi/d$ gezeigt. In die Gleichung (5.72) eingesetzt entspricht dies den Autokorrelationen $S_{0;xx}(\boldsymbol{\kappa}, y = y' = 0, t)$ und $S_{0;yy}(\boldsymbol{\kappa}, y = y' = 0, t)$, falls in der Entwicklung nur eine einzige Mode (N = 1) berücksichtigt wird.

Zeitabhängigkeit der Korrelationsfunktion

Die Korrelation fällt demnach, wie in Abbildung 5.3 dargestellt, exponentiell mit der Zeit ab. Die Relaxationszeit $\tau = \frac{1}{\nu(\kappa^2 + K_{\alpha n}^2)}$, wächst also mit zunehmender Wellenlänge an. Dies entspricht den Betrachtungen aus Abschnitt 3.2.2 für eine hydrodynamische Mode. Da im Gegensatz zur unendlich ausgedehnten Flüssigkeit das Betragsquadrat der Gesamtwellenzahl wegen $K_{\alpha n}^2 > 0$ nie gleich Null werden kann, $M_{\alpha n}^2 = \kappa_x^2 + K_{\alpha n}^2 + \kappa_z^2 > 0$, gibt es keinen Korrelationsbeitrag, der, vergleichbar mit dem Fall $\mathbf{k} \to 0$ im unendlich ausgedehnten Gefäß, unendlich lange existiert. Den kleinst möglichen Wert für $M_{\alpha n}^2$ erhält man für $\kappa = 0$ und $K_{-1} = \pi/d$, so dass $\underline{\mathbb{S}}_{0,(-1)(-1)}(\kappa = 0, t = 0)$ mit der Relaxationszeit $\tau_{max} = \frac{1}{\nu K_{-1}^2} = \frac{d^2}{\nu \pi^2}$ am längsten besteht. Die endliche Relaxationszeit ist also eine Eigenschaft der endlichen Systemgröße.

Statische Korrelation

Die statische Korrelationsmatrix $\underline{S}_0(\kappa, t = 0)$ für die Entwicklungskoeffizienten hat die folgende schematische Struktur:

Die einzelnen durch die farbigen Kästchen repräsentierten Untermatrizen sind im Folgenden aufgelistet:

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (5.92)$$

$$= \underbrace{\mathbb{S}}_{0;(-n)(-m)}(t=0)$$

$$= \frac{Q^2}{M_{-n}^2} \delta_{nm} \begin{pmatrix} (M_{-n}^2 - \kappa_x^2) & 0 & -\kappa_x \kappa_z \\ 0 & (M_{-n}^2 - K_{-n}^2) & 0 \\ -\kappa_x \kappa_z & 0 & (M_{-n}^2 - \kappa_z^2) \end{pmatrix}, \quad (5.93)$$

$$= \underbrace{\mathbb{S}}_{0;(-n)(-m)}(t=0)$$

$$= \frac{Q^2}{M_{-n}^2} \delta_{nm} \begin{pmatrix} (M_{-n}^2 - \kappa_x^2) & 0 & -\kappa_x \kappa_z \\ 0 & (M_{-n}^2 - K_{-n}^2) & 0 \\ -\kappa_x \kappa_z & 0 & (M_{-n}^2 - \kappa_z^2) \end{pmatrix}, \quad (5.94)$$

$$= \underline{\mathbb{S}}_{0;(-n)(\sim m)}(t=0)$$

$$= -\frac{4}{d}Q^{2}i(-1)^{n+m}\frac{K_{-n}K_{\sim m}}{M_{-n}^{2}M_{\sim m}^{2}}\begin{pmatrix} 0 & \kappa_{x} & 0\\ \kappa_{x} & 0 & \kappa_{z}\\ 0 & \kappa_{z} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (5.95)$$

$$= \underline{\mathbb{S}}_{0;(\sim n)(-m)}(t=0)$$

$$= \frac{4}{d}Q^{2}i(-1)^{n+m}\frac{K_{-m}K_{\sim n}}{M_{-m}^{2}M_{\sim n}^{2}} \begin{pmatrix} 0 & \kappa_{x} & 0\\ \kappa_{x} & 0 & \kappa_{z}\\ 0 & \kappa_{z} & 0 \end{pmatrix}.$$
 (5.96)

Die Diagonalblöcke von $\underline{\mathbb{S}}_0(\boldsymbol{\kappa}, t = 0)$ sind symmetrisch in den Komponenten des Wellenzahlvektors $\boldsymbol{\kappa}$ und der Entwicklungsmode $K_{\alpha n}$, während die nichtdiagonalen Blockmatrizen antisymmetisch sind. Die Struktur gleicht insgesamt derjenigen für die Korrelationsmatrix einer unendlich ausgedehnten Flüssigkeit (3.33). Die imaginären Beiträge in (5.95) und (5.96) treten auf, weil in der zu den Platten senkrechten *y*-Richtung die Darstellung durch Sinus und Cosinus gewählt wurde, während in den beiden anderen Richtungen die Fourierdarstellung durch die *e*-Funktion benutzt wurde. Ersetzt man hingegen die Sinus-Funktion durch $\sin(x) = \frac{1}{2i} (e^{ix} - e^{-ix})$, so kürzt sich die imaginäre Einheit *i* weg.

Energiedichte

Neben den Korrelationen der verschiedenen Geschwindigkeiten untereinander ist es interessant, die Summe $\sum_i \langle v_i^2 \rangle$ zu betrachten, da sie proportional zur spezifischen Energie ist, wie es auch schon in Abschnitt 3.40 besprochen wurde. Definiert man die Entwicklungskoeffizienten der spezifischen Energie als

$$e_{(\alpha n)(\beta m)}(\kappa) := \frac{1}{2} \sum_{i} \mathsf{S}_{0,(\alpha n i)(\beta m i)}(\kappa, t = 0) = Q^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} , \qquad (5.97)$$

so erhält man nach einer Rücktransformation in x- und z-Richtung

$$e_{(\alpha n)(\beta m)}(\mathbf{r}) = Q^2 \delta(\mathbf{r}) \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} \,. \tag{5.98}$$

Da dieser Ausdruck für beliebige n und α konstant ist, entspricht die hierraus resultierende Funktion, nachdem man sie über die Basisfunktionen aufsummiert hat, einer Darstellung von $\delta(y - y')$ im Raum eben dieser Basisfunktionen.¹⁰ Man kann somit die entdimensio-

$$\int_{-d/2}^{d/2} dy \,\varphi_{\alpha n}(y) \int_{-d/2}^{d/2} dy' \,\varphi_{\beta m}(y') \delta(y-y') = \int_{-d/2}^{d/2} dy \,\varphi_{\alpha n}(y) \varphi_{\beta m}(y) = \delta_{\alpha \beta} \delta_{nm}(y) \delta(y-y')$$

¹⁰ Es gilt für die Projektion von $\delta(y-y')$ auf die Basisfunktionen $\varphi_{\alpha n}(y)$ und $\varphi_{\beta m}(y')$:

nalisierte, lokale spezifische Energie der Fluktuationen insgesamt in der Form

(

$$e(\mathbf{r}, y, y_0) = Q^2 \delta(\mathbf{r}) \frac{2}{d} \sum_n \cos(K_{-n}y) \cos(K_{-n}y_0) + \sin(K_{\sim n}y) \sin(K_{\sim n}y_0)$$
$$= Q^2 \delta(\mathbf{r}) \delta_{\varphi}(y - y_0)$$
(5.99)

schreiben, wobe
i $\delta_{\varphi}(y-y_0)$ stellvertretend für die Darstellung von
 $\delta(y-y_0)$ im Funktionenraum steht:

$$\delta_{\varphi}(y-y_0) := \sum_{n} \varphi_{-n}(y)\varphi_{-n}(y_0) + \varphi_{\sim n}(y)\varphi_{\sim n}(y_0).$$
(5.100)



Abb. 5.4: Das Integral $\int_{-h/2}^{h/2} dy \delta_{\varphi}(y - y_0)$ von der Darstellung $\delta_{\varphi}(y - y_0)$ aus Gleichung (5.100), aufgetragen als Funktion von y_0 über den gesamten Kanalquerschnitt h = d = 2.0 (durchgezogenen Linie), für h = 0.2 (gepunktete Linie) mit N = 1000 und für h = d = 2.0 mit Hilfe von Chadrasekhar-Polynomen [65] (gestrichpunktete Linie) mit N = 400 Moden. Die einzelnen Kurven wurden so normiert, dass das Integral hierüber gerade gleich dem Plattenabstand d = 2.0 wird.

Wie $\delta_{\varphi}(y - y_0)$ tatsächlich durch das Funktionensystem dargestellt wird, ist in der Abbildung 5.4 anhand des Integrals $\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \delta_{\varphi}(y - y_0)$ als Funktion von y_0 gezeigt. In der Nähe der Wände fällt das Integral wie gewünscht gegen Null ab. Im Kanalzentrum ist der Wert entsprechend größer als Eins, so dass eine weitere Integration über y_0 von $-\frac{d}{2}$ bis $\frac{d}{2}$ gerade gleich d wird.¹¹ Die zweifache Mittelung der spezifischen Energie $e(\mathbf{r}, y, y_0)$ über den ganzen Raum vom Volumen V liefert also $\frac{Q^2}{V}$ und entspricht damit dem Wert, den man für ein unendlich ausgedehntes Gefäß in Abschnitt 3.40 erhalten hat.

$$d\frac{8}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(2n-1)^2} = d.$$
(5.101)

¹¹Integriert man die Gleichung (5.100) sowohl über y als auch über y_0 über den gesamten Kanalquerschnitt d, so erhält man eine unendliche Reihe mit der Lösung

Direkte Ortsabhängigkeit

Die statische Korrelationsmatrix $\underline{\mathbb{S}}_0(\mathbf{r}, t = 0)$ in Abhängigkeit des in der xz-Ebene gelegenen Abstandsvektors \mathbf{r} erhält man nach einer Rücktransformation der Matrix $\underline{\mathbb{S}}_0(\boldsymbol{\kappa}, t = 0)$ aus Gleichung (5.91):

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(\mathbf{r}, t=0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^{2}} \underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa}, t=0) e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} \,.$$
(5.102)

Wie im Anhang F gezeigt, führt die Rücktransformation in den zwei Dimensionen auf verschiedene Besselfunktionen. Die Berechnung der Transformation wurde durch das Software-Paket Waterloo Maple [67] unterstützt durchgeführt. Hierzu wurde in (5.102) das Integral über κ durch ein Integral in ebenen Polarkoordinaten ersetzt und die Komponenten von κ , wie im Anhang F gezeigt, durch den Einheitsvektor $\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$ in Richtungen des Ortsvektors ausgedrückt. Nach einer Integration über die Richtungen von κ ergeben sich die Besselfunktionen. Eine anschließende Partialbruchzerlegung des Integranden bezüglich des Betrages $\kappa = |\kappa|$ führt auf eine Summe aus Integralen, die durch die in (F.18) definierten Funktionen $f_{\nu,n}(K,r)$ und $g_{\nu,n}(K,r)$ abgekürzt werden und deren Lösungen in den Tabellen F.2 und F.3 aufgelistet sind.

Es macht hier Sinn, als charakteristische Länge den halben Wandabstand $L = \frac{d}{2}$ zu wählen, so dass für den entdimensionalisierten Wandabstand d = 2 gilt. Für die ruhende Flüssigkeit ergibt sich zusammen mit der in (F.15) definierten Funktion $\delta(\mathbf{r})$ für die Korrelation der Entwicklungskoeffizienten insgesamt

$$\underline{\mathbb{S}}_{0;(\alpha n)(\alpha m)}(\mathbf{r}) = Q^2 \delta_{nm} \left\{ \left(\underline{I} - \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} \right) \tilde{\delta}(\mathbf{r}) + \left(\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} - \hat{e}_y \hat{e}_y \right) K_{\alpha n}^2 g_{01}(K_{\alpha n}, r) \right)$$

$$- \frac{1}{r} \left(\underline{I} - \hat{e}_y \hat{e}_y - 2\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} \right) \left(f_{10}(K_{\alpha n}, r) - K_{\alpha n}^2 f_{11}(K_{\alpha n}, r) \right) \right\}$$
(5.103a)

und

$$\underline{\mathbb{S}}_{0;(-n)(\sim m)}(\mathbf{r}) = Q^{2}(-1)^{(n+m)} \frac{K_{-n}K_{\sim m}}{(K_{-n}^{2} - K_{\sim m}^{2})} \times$$

$$\begin{pmatrix} K_{-n}^{2} f_{11}(K_{-n}, r) - K_{\sim m}^{2} f_{11}(K_{\sim m}, r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{r}_{x} & 0\\ \hat{r}_{x} & 0 & \hat{r}_{z}\\ 0 & \hat{r}_{z} & 0 \end{pmatrix},$$
(5.103b)

$$\underline{\mathbb{S}}_{0;(\sim n)(-m)}(\mathbf{r}) = -Q^2 (-1)^{(n+m)} \frac{K_{\sim n} K_{-m}}{(K_{\sim n}^2 - K_{-m}^2)} \times$$

$$\left(K_{\sim n}^2 f_{11}(K_{\sim n}, r) - K_{-m}^2 f_{11}(K_{-m}, r) \right) \begin{pmatrix} 0 & \hat{r}_x & 0\\ \hat{r}_x & 0 & \hat{r}_z\\ 0 & \hat{r}_z & 0 \end{pmatrix}.$$
(5.103c)

98
Hierbei ist $\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$ der sich in der *xz*-Ebene befindliche Einheitsvektor in Richtung des Ortsvektors \mathbf{r} und die Funktionen f_{ij} sind in der Tabelle F.2 aufgelistet. Die Entwicklungskoeffizienten (5.103) haben offensichtlich die Eigenschaft, dass $\underline{\mathbb{S}}_{0;(-n)(\sim m)}(\mathbf{r}) = \underline{\mathbb{S}}_{0;(\sim m)(-n)}^{\dagger}(-\mathbf{r}) = -\underline{\mathbb{S}}_{0;(\sim m)(-n)}(\mathbf{r})$ gilt. Die vollständige Lösung für die Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen im Ortsraum erhält man mit Hilfe der Gleichung (5.71) wie folgt:

$$\underline{S}_{0;ij}(\mathbf{r}, y, y', t = 0) = \frac{2}{d} \sum_{n} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0;(-n)(-n)}(\mathbf{r}) \cos(K_{-n}y) \cos(K_{-n}y') + \underline{\mathbb{S}}_{0;(\sim n)(\sim n)}(\mathbf{r}) \sin(K_{\sim n}y) \sin(K_{\sim n}y') \right) \\
+ \frac{2}{d} \sum_{n,m} \underline{\mathbb{S}}_{0;(-n)(\sim m)}(\mathbf{r}) \left(\cos(K_{-n}y) \sin(K_{\sim n}y') - \cos(K_{-n}y') \sin(K_{\sim n}y) \right). \quad (5.104)$$

An der gleichen y-Position, y = y', verschwindet die hintere Summe. Die Lösung divergiert für $r \to 0$, behält jedoch weiterhin ihre Richtungsabhängigkeit.

Unter der Annahme einer $\delta(\mathbf{r})$ -korrelierten Lösung wäre die Fluktuationsstärke durch den Vorfaktor der δ -Funktion gegeben. Diesen Vorfaktor erhält man durch Integration über den gesamten Raum. Die Ortsabhängigkeit ist hier aber komplizierter, so dass zur Charakterisierung der Fluktuationsstärke der zuvor in Abschnitt 5.4.3 eingeführte Mittelwert über ein Zylindervolumen benutzt wird. Diesen erhält man durch zweifache Integration des Ortsvektors, sowohl über \mathbf{r} als auch über \mathbf{r}' . Die Herleitung lehnt sich an diejenige der statischen Korrelation in der Referenz [59] an.

Einfluss auf ein Testteilchen

Im Folgenden wird die Korrelation der über ein Zylindervolumen gemittelten Geschwindigkeitsfluktuationen, wie es in Abschnitt 5.4.3 mit der Gleichung (5.84) eingeführt wurde, bestimmt. Als charakteristische Länge bietet sich jetzt der Zylinderradius $L = \check{a}$ an, wodurch die dimensionslosen Längen a = 1 und $d = \frac{d}{\check{a}}$ sind. In den Berechungen wird, wenn nicht explizit angegeben, die Zylinderhöhe gleich seinem Durchmesser gewählt, h = 2. Die über die Fläche gemittelten und von Null verschiedenen Koeffizienten der Korrelationsmatrix sind dann gegeben durch

$$\left[\left[\mathsf{S}_{0;(\alpha n x)(\beta m x)}(t=0) \right] \right]_{A_Z} = \left[\left[\mathsf{S}_{0;(\alpha n z)(\beta m z)}(t=0) \right] \right]_{A_Z} \\ = \frac{Q^2}{A_Z} \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm} \left(1 - K_1(K_{\alpha n}) I_1(K_{\alpha n}) \right), \tag{5.105a}$$

$$\left[\left[\mathsf{S}_{0;(\alpha n y)(\beta m y)}(t=0)\right]\right]_{A_Z} = 2\frac{Q^2}{A_Z}\delta_{\alpha\beta}\delta_{nm}K_1(K_{\alpha n})I_1(K_{\alpha n}).$$
(5.105b)

Hierbei sind $K_n(x)$ und $I_n(x)$ die "Modifizierten Besselfunktionen" [66]. Diese sind nicht zu verwechseln mit den $K_{\alpha n}$, die weiterhin den in (5.66) definierten Wellenzahlen entsprechen. Da das System bezüglich der zu den Wänden parallelen xz-Ebene rotationssymmetrisch ist, liegt in dieser Ebene Isotropie vor und die beiden Beiträge (5.105a) sind gleich groß.

Die Korrelation in y-Richtung (5.105b) ist davon hingegen verschieden. Wie zu erwarten, bleibt die der spezifischen Energie proportionale Summe über alle Beiträge aus (5.105) unabhängig von d und konstant.

Mit (5.105) ergibt sich nach Gleichung (5.81) die Gesamtlösung für die statische Korrelation zu

$$\left[\left[\underline{S}_{0}(y_{0},t)\right]\right]_{V_{Z}} := \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\varphi_{\alpha n}(y_{0})\right]_{h} \left[\varphi_{\beta m}(y_{0})\right]_{h} \left[\left[\underline{\mathbb{S}}_{0;(\alpha n)(\alpha n)}(t)\right]\right]_{A_{Z}}.$$
(5.106)

Setzt man alle Funktionen ein, so kann man den Vorfaktor

$$\frac{Q^2}{V_Z} = \frac{k_B T}{\check{\rho}_0 2\pi \check{a}^3} \frac{1}{U^2}$$
(5.107)

abspalten, der für ein festes \check{a} und mit der Wahl h = 2 für die Zylinderhöhe eine Konstante ist. Die Gleichung (5.106) hängt somit über die Wellenzahlen K_{-n} und $K_{\sim n}$ aus (5.66) nur noch vom relativen Abstand $d = \frac{\check{d}}{\check{a}}$ ab.

Lässt man die Systemgröße d jetzt gegen Unendlich gehen, so würde man erwarten, dass man ungefähr zu dem Ergebnis aus der analytischen Rechnung 3.37 gelangt und für jede Richtung den gleich großen Wert $\frac{2}{3} \frac{Q^2}{V_K}$ erhält. In den einzelnen durch (5.105) gegebenen Summanden von (5.106) verschwindet im Grenzfall $d \to \infty$ jedoch das Argument der Besselfunktion, welches am Beispiel der symmetrischen Mode durch $K_{-n}^a = (2n - 1)\pi/d$ gegeben ist, und mit ihm die Besselfunktionen selbst. Für eine endliche Summe wäre im betrachteten Grenzfall die Autokorrelation der Geschwindigkeiten in y-Richtung gleich Null und für jene in die beiden anderen Richtungen ergäbe sich jeweils der Beitrag $\frac{Q^2}{A_{\kappa}}$.

Dies widerspricht den tatsächlich gefundenen numerischen Werten für große, aber endliche Plattenabstände d, wie sie in der Abbildung 5.5 für $\frac{1}{d} \rightarrow 0$ geplottet sind. Die gemittelte Korrelation scheint mit wachsendem d demnach gegen einen endlichen Wert zu konvergieren. Die Erklärung hierfür ist, dass in Gleichung (5.106) eine unendliche Summe steht, so dass sich für einen beliebig großen Wert für d mehrere n in dessen Umgebung finden, so dass $n \simeq d$ gilt und damit die Argumente der Besselfunktionen in (5.105), wie auch die Funktion selbst, endlich sind.

Diskussion

Die Abbildung 5.5 zeigt die über ein Zylindervolumen gemittelte Autokorrelationen der transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen in x- und y-Richtung, wie sie sich aus den Gleichungen (5.106), als Funktion des inversen Plattenabstand d^{-1} ergeben. Die Funktion wurde an der Stelle $y_0 = 0$ für einen Zylinder vom Radius a = 1 und der Höhe h = 2 ausgewertet und durch die in (5.107) bestimmte Konstante Q^2/V_Z geteilt.

Der Grenzfall $d \to \infty$ für die unendlich ausgedehnte Flüssigkeit findet sich in der Abbildung an der Stelle $\frac{1}{d} = 0$. Im Gegensatz zu dem nach (4.53) erwarteten und für alle Richtungen gleich großen Wert von 2/3 finden sich hier die davon verschiedenen Werte $\simeq 0.65$ für die Autokorrelation in x-Richtung und $\simeq 0.69$ für diejenige in y-Richtung. Es



Abb. 5.5: Die über ein Zylindervolumen vom Radius a = 1 und der Höhe h = 2 gemittelten Korrelationen $[[S_{0;xx}]]_{V_Z} / (Q^2/V_Z)$ (schwarze Kreise) und $[[S_{0;yy}]]_{V_Z} / (Q^2/V_Z)$ (rote Quadrate) aus Gleichung (5.106) als Funktion des inversen Plattenabstandes 1/d. Für 1/d = 0.5, also d = 2, entspricht der Plattenabstand gerade der Höhe des Zylinders.

liegt also, obwohl das Verhältnis von der Zylinderausdehnung zum Wandabstand sehr klein ist, nicht die erwartete Isotropie vor. Diese unterschiedlichen Absolutwerte der Autokorrelationen $[[S_{0;xx}]]_{V_Z}$ und $[[S_{0;yy}]]_{V_Z}$, insbesondere im Grenzfall $d \to \infty$, sind darauf zurückzuführen, dass über ein Zylindervolumen anstelle eines Kugelvolumens gemittelt wurde.¹² Für die Korrelation $[[S_{0;yy}]]_{V_Z}$ erhält man aus der analytischen Lösung (3.33) nach zweifacher numerischer Integration über ein Zylindervolumen den Wert $0.688 \frac{Q^2}{V_z}$ und für die Komponenten $[[S_{0;xx}]]_{V_Z} = [[S_{0;zz}]]_{V_Z} = 0.656 \frac{Q^2}{V_z}$, die mit den oben genannten sehr gut übereinstimmen. Der Trend aber, dass mit abnehmendem d die Autokorrelation $[[S_{0;yy}]]_{V_Z}$ abnimmt und $[[S_{0;xx}]]_{V_Z}$ zunimmt, ist unabhängig von der Wahl der Volumenform und beschreibt den generellen Einfluss der beiden Wände auf die Geschwindigkeitsfluktuationen in der Flüssigkeit. Diese Anisotropie in der Autokorrelationsfunktion hat möglicherweise Auswirkungen auf die Brownsche Dynamik von Teilchen in Kapillaren.

Nimmt man also, wie im Abschnitt 4.7 beschrieben, als Näherung wieder eine Gaußverteilung der Fluktuationsgeschwindigkeiten an, so kann man die Verteilungungsfunktion wie in (4.57) darstellen:

$$\mathcal{P}([\mathbf{v}]_{V_Z}) \sim e^{-[\mathbf{v}]_{V_Z}^T [\underline{[S]}]_{V_Z}^{-1} [\mathbf{v}]_{V_Z}} .$$
(5.108)

Die Geschwindigkeitsvektoren, die sich auf einem Ellipsoid mit den Halbachsen $\sqrt{[[S_{0;xx}]]_{V_Z}} = \sqrt{[[S_{0;zz}]]_{V_Z}}$ und $\sqrt{[[S_{0;yy}]]_{V_Z}}$ befinden, treten dann mit gleicher Wahr-

¹² Bei der Integration über einen Zylinder werden die Integralbeiträge mit einem Winkel von ~ $\frac{\pi}{2}$ relativ der Plattenebene stärker gewichtet als im Falle der Kugel.

scheinlichkeit auf. In Richtung der größeren Halbachse treten also vermehrt Fluktuationen mit größerem Geschwindigkeitsbetrag auf, als senkrecht dazu. Für schrumpfende Wandabstände wachsen die beiden Halbachsen, die parallel zu den Wänden liegen, an und diejenige senkrecht zu den Wänden verringert sich. Es treten also häufiger große Geschwindigkeitsbeträge parallel als senkrecht zu den Wänden auf, beziehungsweise die Wände schränken die Geschwindigkeitsfluktuationen in Wandrichtung ein.

Betrachtet man ein Objekt, welches sich in der Flüssigkeit befindet, so spürt es vorwiegend solche Fluktuationen deren Wellenlänge ungefähr gleich groß oder größer ist als die eigene Abmessung. Das gleiche passiert bei der Mittelung über das Volumen. Beides ähnelt dem Abschneiden bei einer maximalen Wellenzahl. In Anlehnung an Abschnitt 3.4 bedeutet dies also, dass für eine kleine Kugel, für welche der Wandabstand sehr groß gegenüber dem Kugeldurchmesser ist, eine nahezu isotrope Verteilung der Geschwindigkeitsfluktuationen vorliegt, während für ein kleines Verhältnis von Wandabstand zu Kugelradius die größeren Fluktuationen parallel zu den Wänden stattfinden.



Abb. 5.6: Die über ein Zylindervolumen vom Radius a = 1 und der Höhe h = 2 gemittelte Korrelationen $[[S_{0;xx}]]_{V_Z} / (Q^2/V_Z)$ (schwarze Linien) und $[[S_{0;yy}]]_{V_Z} / (Q^2/V_Z)$ (rote Linien) aus Gleichung (5.106) als Funktion von $y_0/(d/2)$ für die Radien d = 100 (durchgezogene Linie) und d = 10 (gestrichelte Linie) geplottet. Die Randwerte $y_0 > |d - a|$ sind nicht aufgetragen, da das entsprechende Volumen über die Wände hinausgehen würde.

In Abbildung 5.6 wurden die über ein Zylindervolumen gemittelten Autokorrelationen ebenfalls für h = 2 für zwei verschiedenen Abstände d als Funktion von $y_0/(d/2)$ aufgetragen. Für große d muss sich das Teilchen sehr dicht an der Wand befinden, damit dieses einen Wandeinfluss auf seine Brownsche Bewegung erfährt. Für kleine Wandabstände setzt der Effekt durch die Wände bereits unweit des Kanalzentrums ein. Anhand der in Abbildung 5.2 verglichenen Entwicklungsmoden für verschiedene Funktionensysteme ist zu erwarten, dass gerade die Autokorrelation in *y*-Richtung im Kanalzentrum tatsächlich stärker ausgeprägt ist als hier und am Rand schneller abfällt, falls solche Entwicklungsfunktionen gewählt werden, die die Randbedingungen vollständig erfüllen.

5.4.5 Lineare Scherratenabhängigkeit der Korrelation

An dieser Stelle soll der Einfluss der Scherströmung auf die Korrelation der transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen betrachtet werden. Der in der entdimensionalisierten Scherrate lineare Anteil der spektralen Dichte der Entwicklungskoeffizienten (5.65) ist gegeben durch die in (5.64a) definierte Matrix $\underline{\mathbb{S}}_1(\kappa, \omega)$. Es ist zweckmäßig, letztere in zwei zueinander adjungierte Matrizen wie folgt zu zerlegen,

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^{\dagger}, \qquad (5.109)$$

wobei das hochgestellt h für "halb" steht und es gilt

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = -\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega).$$
(5.110)

Nutzt man die Eigenschaft (C.9) der Fouriertransformation aus, ergibt sich aus (5.109) die zeitabhängige Korrelation

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}(\boldsymbol{\kappa},t) = \underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},-t)\right)^{\dagger}.$$
(5.111)

Es genügt also die Rücktransformation für den Anteil $\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega)$ durchzuführen. Das Matrixprodukt (5.110) im Frequenzraum wird nach einer Rücktransformation in die Zeit zum Faltungsintegral

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ \underline{\mathcal{B}}(\tau,\boldsymbol{\kappa})\underline{\mathbb{S}}_{0}(t-\tau,\boldsymbol{\kappa}).$$
(5.112)

Mit Hilfe der Lösung für $\underline{\mathbb{S}}_0(\boldsymbol{\kappa}, t)$ aus (5.90) und der in die Zeit zurücktransformierten Matrixfunktion $\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa}, \omega)$ aus Gleichung (5.62),

$$\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},t) = \Theta(t)e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})t} \ \underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa}), \qquad (5.113)$$

lässt sich das Faltungsintegral (5.112) nach Anpassen der Integralgrenzen wie folgt Darstellen

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t) = -\int_{0}^{\infty} d\tau \left(\Theta(t-\tau)e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\tau} \underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa})e^{-\mathbb{A}(\boldsymbol{\kappa})(t-\tau)}\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t=0) + \Theta(\tau-t)e^{-\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})\tau} \underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa})\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},t=0)e^{\mathbb{A}(\boldsymbol{\kappa})(t-\tau)}\right).$$
(5.114)

Führt man eine Fallunterscheidung bezüglich der Zeitrichtung durch, kann man das Integral aufspalten und mit Hilfe der Heaviside Θ - Funktion als Summe der Lösungen für positive und negative Zeiten schreiben,

$$\begin{split} \underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(t) &= \Theta(t) \left[\int_{t}^{\infty} d\tau e^{-\underline{\mathbb{A}}\,\tau} \left(-\underline{\mathbb{B}}\,\underline{\mathbb{S}}_{\,0}(t=0) \right) e^{\underline{\mathbb{A}}\,(t-\tau)} \\ &+ \int_{0}^{t} d\tau e^{-\underline{\mathbb{A}}\,\tau} \left(-\underline{\mathbb{B}}\,\right) e^{-\underline{\mathbb{A}}\,(t-\tau)} \underline{\mathbb{S}}_{\,0}(t=0) \right] \\ &+ \Theta(-t) \left[\int_{0}^{\infty} d\tau e^{-\underline{\mathbb{A}}\,\tau} \left(-\underline{\mathbb{B}}\,\underline{\mathbb{S}}_{\,0}(t=0) \right) e^{\underline{\mathbb{A}}\,(t-\tau)} \right], \end{split}$$

wobei die Abhängigkeit von κ der besseren Übersichtlichkeit wegen nicht angegeben wurde. Die Lösung für die Komponente $\nu\mu$ der Matrix, mit $\nu = (\alpha ni)$ und $\mu = (\beta mj)$, hat dann die folgende Gestalt:

$$S_{1;\nu\mu}^{h}(t) = \Theta(t) \left[\frac{-e^{-\mathbb{A}_{\nu\nu}t}}{(\mathbb{A}_{\nu\nu} + \mathbb{A}_{\mu\mu})} \left(\underline{\mathbb{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \right)_{\nu\mu} + \sum_{\substack{k \\ A_{kk} \neq A_{\nu\nu}}} \frac{1}{(\mathbb{A}_{\nu\nu} - \mathbb{A}_{kk})} \left(e^{-\mathbb{A}_{\nu\nu}t} \mathbb{B}_{\nu k} \mathbb{S}_{0;k\mu} - \mathbb{B}_{\nu k} e^{-\mathbb{A}_{kk}t} \mathbb{S}_{0;k\mu} \right) - \sum_{\substack{k \\ A_{kk} = A_{\nu\nu}}} t \mathbb{B}_{\nu k} e^{-\mathbb{A}_{kk}t} \mathbb{S}_{0;k\mu} \right] + \Theta(-t) \left(\underline{\mathbb{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \right)_{\nu\mu} \frac{-e^{\mathbb{A}_{\mu\mu}t}}{(\mathbb{A}_{\nu\nu} + \mathbb{A}_{\mu\mu})}.$$
(5.115)

Während im unendlich ausgedehnten Fall die verschiedenen k-Moden unabhängig voneinander sind, besteht hier eine Kopplung, da das Matrixprodukt $\underline{\mathbb{B}} \underline{\mathbb{S}}_0$ keine Diagonalmatrix bezüglich der Indexpaare n, m und α, β darstellt und sich nach (5.69) die Einträge der Matrix $\underline{\mathbb{A}}$ für $n \neq m$ und $\alpha \neq \beta$ unterscheiden. Es sind hier gerade diejenigen Anteile des Matrixproduktes $\underline{\mathbb{B}} \underline{\mathbb{S}}_0$ für die Kopplung verantwortlich, die der Näherung in der analytischen Rechnung in Kapitel 4.2 zum Opfer gefallen sind und die in der statischen Lösung, wie sich später bei der Diskussion auf Seite 111 herausstellen soll, zumindest für kleine Längen, nur geringen Einfluss auf die Lösung haben. Für die Einträge $\nu = \mu$ gleicht die zeitabhängige Lösung (5.115) jedoch derjenigen für die unendlich ausgedehnte Flüssigkeit in Gleichung (4.47).

Zeitabhängigkeit

Die Zeitabhängigkeit der xy-Komponente der Geschwindigkeitskorrelation ist in der Abbildungen 5.7 dargestellt. Im oberen Teil der Abbildung 5.7 wurde der Wellenzahlvektor κ in Richtung der z-Achse gelegt. Falls der Ortsvektor **r** in x-Richtung orientiert ist, liefert dieser Anteil während der Rücktransformation in den Ortsraum den größten Beitrag.¹³

Man erkennt, wie zuvor bei der analytischen Abschätzung schon beschrieben, dass die Korrelation unsymmetrisch bezüglich einer Zeitspiegelung $t \to -t$ ist und der vom Betrag maximale Wert nicht bei t = 0, sondern zu positiven t verschoben liegt. Es sei hier erinnert, dass $S_{yx}(t) = S_{xy}(-t)$ gilt, die Kurve also für negative Zeiten die Korrelation von $v_y(t)$ mit $v_x(t = 0)$ wiederspiegelt.

Im unteren Teil der Abbildung 5.7 wurde der Wellenzahlvektor in Richtung der x-Achse gewählt. Dies liefert den Hauptbeitrag im Ortsraum, falls der Ortsvektor in z-Richtung

¹³ Wenn **r** und $\boldsymbol{\kappa}$ senkrecht zueinander stehen gilt $i\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\kappa} = 0$ für das Argument der Exponentialfunktion im Fourierintegral, so dass die Exponentialfunktion mit dem Wert 1, unabhängig vom Betrag $|\boldsymbol{\kappa}|$, ihren größt möglichen Wert annimmt. Der Beitrag hat im Fourierintegral also das größte Gewicht.

orientiert ist. Wie bei der analytischen Rechnung schon gesehen, ist die statische Kreuzkorrelation hierfür positiv. Im Gegensatz zum unendlich ausgedehnten Fall, bei welchem die zeitliche Abhängigkeit unabhängig von der Richtung war, wechselt jetzt die Korrelation bei einer endlichen positiven Zeit das Vorzeichen und hat neben dem nach negativen Zeiten verschobenen Maximum ein Minimum auf der positiven Zeitachse. Das Zeitverhalten ist auch hier nicht symmetrisch.



Abb. 5.7: Die Zeitabhängigkeit des Elementes $S_{1,(11x)(11y)}(\kappa, t)$ der Matrix (5.111) der Entwicklungskoeffizienten, welches der Korrelationskomponente $S_{1,xy}(\kappa, y = 0, t)$ entspricht, falls in der Entwicklung aus Gleichung (5.72) nur ein einziger Koeffizient (N = 1) berücksichtigt wird. In der **oberen** Abbildung zeigt der Wellenzahlvektor in Richtung der z-Achse, $\hat{\kappa} = \hat{e}_z$ und in der **unteren** Abbildung in Richtung der x-Achse, $\hat{\kappa} = \hat{e}_x$. Die Funktionen sind jeweils für drei verschiedene Beträge der Wellenzahl, $\kappa = \frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{2d}, \frac{\pi}{4d}$ und für d = 2, dargestellt.

Statische Korrelation

Für t = 0 ergibt sich aus (5.115) die statische Korrelation

$$\mathbb{S}_{1;\nu\mu}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t=0) = -\frac{\left(\underline{\mathbb{B}}\left(\boldsymbol{\kappa}\right)\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa})\right)_{\nu\mu}}{\left(\mathbb{A}_{\nu\nu}(\boldsymbol{\kappa}) + \mathbb{A}_{\mu\mu}(\boldsymbol{\kappa})\right)}.$$
(5.116)

Die Struktur der Lösung $\underline{\mathbb{S}}_1$ ist

mit den einzelnen Komponenten

$$= \underline{\mathbb{S}}_{1;(-n)(-m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{1;(-m)(-n)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0))\right)^{\dagger}$$
(5.118a)

sind die Elemente gegeben durch

$$\begin{split} \underline{\mathbb{S}}_{1;(-n)(-m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t=0) &= -\frac{Q^2}{2\nu} \frac{\kappa^2}{M_{-n}^6} \delta_{nm} \begin{pmatrix} 0 & M_{-n}^2 - 2\kappa_x^2 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & -2\kappa_x\kappa_z & 0 \end{pmatrix} \\ &+ 32 \frac{Q^2}{\nu d^2} (-1)^{(n+m)} \frac{K_{-n}K_{-m}}{M_{-n}^2 M_{-m}^2 (M_{-n}^2 + M_{-m}^2)} \sum_k \frac{K_{\sim k}^2}{(K_{\sim k}^2 - K_{-n}^2)^2} \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x^2 \frac{M_{-n}^2}{M_{\sim k}^2} & 0\\ \kappa_x^2 & 0 & \kappa_x\kappa_z\\ 0 & \kappa_x\kappa_z \frac{M_{-n}^2}{M_{\sim k}^2} & 0 \end{pmatrix}, \end{split}$$

für die Untermatrix

$$= \underline{\mathbb{S}}_{1;(\sim n)(\sim m)}^{h} (\boldsymbol{\kappa}, t = 0) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{1;(\sim m)(\sim n)}^{h} (\boldsymbol{\kappa}, t = 0))\right)^{\dagger}$$
(5.118b)

106

 durch

$$\begin{split} \underline{\mathbb{S}}_{1;(\sim n)(\sim m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t=0) &= -\frac{Q^2}{2\nu} \frac{\kappa^2}{M_{\sim n}^4} \delta_{nm} \begin{pmatrix} 0 & M_{\sim n}^2 - 2\kappa_x^2 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & -2\kappa_x\kappa_z & 0 \end{pmatrix} \\ &- 32 \frac{Q^2}{\nu d^2} (-1)^{(n+m)} \frac{K_{\sim n}K_{\sim m}}{M_{\sim n}^2 M_{\sim m}^2 (M_{\sim n}^2 + M_{\sim m}^2)} \sum_k \frac{K_{-k}^2}{(K_{-k}^2 - K_{\sim n}^2)^2} \begin{pmatrix} 0 & \kappa_x^2 \frac{M_{\sim n}^2}{M_{-k}^2} & 0\\ \kappa_x^2 & 0 & \kappa_x\kappa_z\\ 0 & \kappa_x\kappa_z \frac{M_{\sim n}^2}{M_{-k}^2} & 0 \end{pmatrix}, \end{split}$$

und die dritte Untermatrix

$$= \underline{\mathbb{S}}_{1;(-n)(\sim m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{1;(\sim m)(-n)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t = 0))\right)^{\dagger}$$
(5.118c)

setzt sich aus den Elementen

$$\underline{\mathbb{S}}_{1;(-n)(\sim m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t=0) = \frac{4}{\nu d} Q^{2} i (-1)^{n+m} \frac{K_{-n} K_{\sim m}}{M_{\sim m}^{2} (M_{-n}^{2} + M_{\sim m}^{2})} \left(-\frac{1}{M_{-n}^{4}} \begin{pmatrix} \kappa_{x} (M_{-n}^{2} - 2\kappa_{x}^{2}) & 0 & \kappa_{z} (M_{-n}^{2} - 2\kappa_{x}^{2}) \\ 0 & 0 & 0 \\ -2\kappa_{x}^{2}\kappa_{z} & 0 & -2\kappa_{x}\kappa_{z}^{2} \end{pmatrix} + 2 \frac{\kappa_{x}}{(K_{\sim m}^{2} - K_{-n}^{2})^{2}} \begin{pmatrix} (M_{\sim m}^{2} - \kappa_{x}^{2}) & 0 & -\kappa_{x}\kappa_{z} \\ 0 & \frac{M_{\sim m}^{2}}{M_{-n}^{2}}\kappa^{2} & 0 \\ -\kappa_{x}\kappa_{z} & 0 & (M_{\sim m}^{2} - \kappa_{z}^{2}) \end{pmatrix} \right),$$

sowie

$$\mathbf{\widetilde{E}}_{1;(\sim n)(-m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t=0) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{1;(-m)(\sim n)}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t=0)\right)^{\dagger}$$
(5.118d)

 mit

$$\begin{split} \underline{\mathbb{S}}_{1;(\sim n)(-m)}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t=0) &= \frac{4}{\nu d} Q^2 i (-1)^{n+m} \frac{K_{-m} K_{\sim n}}{M_{-m}^2 (M_{-m}^2 + M_{\sim n}^2)} \left(\\ & \frac{1}{M_{\sim n}^4} \begin{pmatrix} \kappa_x (M_{\sim n}^2 - 2\kappa_x^2) & 0 & \kappa_z (M_{\sim n}^2 - 2\kappa_x^2) \\ 0 & 0 & 0 \\ -2\kappa_x^2 \kappa_z & 0 & -2\kappa_x \kappa_z^2 \end{pmatrix} \\ & + 2 \frac{\kappa_x}{(K_{-m}^2 - K_{\sim n}^2)^2} \begin{pmatrix} (M_{-m}^2 - \kappa_x^2) & 0 & -\kappa_x \kappa_z \\ 0 & \frac{M_{-m}^2}{M_{\sim n}^2} \kappa^2 & 0 \\ -\kappa_x \kappa_z & 0 & (M_{-m}^2 - \kappa_z^2) \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \end{split}$$

zusammen.

107

Medium	Platten abstand \check{d}	kinem. Viskosität $\check{\nu}$	Scherrate $\check{\dot{\gamma}}$	$\mathrm{Re}^{\dot{\gamma},d}$
Wasser:	1 cm	$1.0 \frac{\mathrm{mm}^2}{s}$	$1\frac{1}{s}$	25.0
Wasser:	1 mm	$1.0 \frac{\mathrm{mm}^2}{s}$	$4\frac{1}{s}$	1.0
Ethanol:	1 cm	$1.52 \frac{\mathrm{mm}^2}{s}$	$1\frac{1}{s}$	16.44
Ethanol:	1 mm	$1.52 \frac{\text{mm}^2}{s}$	$4\frac{1}{s}$	0.65

Tabelle 5.1: Beispiele für die Größenordnung der Reynoldszahl.

Homogene Fluktuationen

Beim Übergang $\kappa \to 0$ verschwinden die Kreuzkorrelationen vollständig. Es existiert demnach keine Korrelation zwischen den Fluktuationen in zwei verschiedene Richtungen, die sich über die ganze *Ebene* ausdehnen. Der Mittelwert über eine unendlich große Fläche, und somit auch über das Gesamtvolumen im Sinne von Abschnitt 5.4.3, sollte demnach ebenso verschwinden.

Reynoldszahl

Die statischen Lösungen (5.118) enthalten den Vorfaktor ν^{-1} . Um die vollständige Lösung für die Korrelation zu erhalten, muss man nach (5.65) noch die dimensionslose Scherrate g an die Matrix \underline{S}_1 aus (5.118) multiplizieren. Damit ist der in der Scherrate lineare Anteil der Korrelationsmatrix proportional zum Quotienten $\frac{g}{\nu} = \frac{\check{\gamma} \tau}{\check{\nu} \tau} L^2$. Die einzige endliche Länge im hier betrachteten Couette-System ist der Plattenabstand d. Wie oftmals auch in der Literatur zu finden ist, wird auch hier für die charakteristische Länge der halbe Plattenabstand $L = \frac{\check{d}}{2}$ gewählt, wodurch der oben genannte, dimensionslose Quotient die Form einer Reynoldszahl erhält:

$$\frac{g}{\nu} = \frac{\dot{\dot{\gamma}}}{\check{\nu}} \left(\frac{\check{d}}{2}\right)^2 =: \operatorname{Re}^{\dot{\gamma}d}.$$
(5.119)

Die Reynoldszahl Re^{$\dot{\gamma}d$} bezieht sich somit auf die maximal auftretende absolute Geschwindigkeit des Lösungsmittels, $u_0\left(\frac{d}{2}\right) = \frac{1}{2}\dot{\gamma}\dot{d}$. In der Tabelle 5.1 wurden beispielhaft Reynoldszahlen für verschiedene Systeme angegeben.

Ortsdarstellung

Die direkte Abhängigkeit vom Ort kann für den linearen Scherbeitrag explizit ausgerechnet werden. Da, wie im Falle der unendlich ausgedehnten Flüssigkeit, nur die xy-Komponente der Korrelation einer Mittelung über ein symmetrisches Testvolumen standhält, soll sich die folgende Betrachtung auf diese Komponente beschränken. Die zuvor gewählte charakteristischen Länge $L = \frac{d}{2}$ impliziert d = 2 für den dimensionslosen Wandabstand.

Mit der Darstellung des zweidimensionalen Ortsvektors in ebenen Polarkoordinaten, $\mathbf{r} = r(\sin \Theta, 0, \cos \Theta)$ und der zur kompakteren Darstellung definierten Funktion

$$R(X) = \frac{2}{r} \Big(2K_1(X) - K_1(X)I_0(X) - I_1(X)K_0(X) \Big), \qquad (5.120)$$

ergeben sich die im Folgenden genannten Korrelationen der Entwicklungskoeffizienten.

Für die symmetrischen Korrelationen erhält man mit n = m für den Anteil der Korrelation bezüglich der symmetrischen Funktionen

$$\begin{aligned} \mathsf{S}_{1;(-nx)(-ny)}(\mathbf{r},t=0) &= \frac{Q^2 \mathrm{Re}^{\dot{\gamma},d}}{16\pi} \Biggl[\left(r^2 K_{-n}^2 K_0(rK_{-n}) - 3rK_{-n}K_1(rK_{-n}) \right) & (5.121a) \\ &- \hat{r}_z^2 \Biggl(r^2 K_{-n}^2 K_0(rK_{-n}) - 4rK_{-n}K_1(rK_{-n}) \Biggr) \\ &+ 4\hat{\mathbf{r}}_z^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K_{-n}K_{\sim l}^2}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^4} \Biggl(2K_{-n}K_{\sim l}R(rK_{\sim l}) - 2K_{-n}^2 R(rK_{-n}) \\ &+ (K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2) \Biggl(r(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)K_1(rK_{-n}) - 4K_{-n}K_0(rK_{-n}) \Biggr) \Biggr) \Biggr] \end{aligned}$$

und für die entsprechenden antisymmetrischen Korrelationen

$$S_{1;(\sim nx)(\sim ny)}(\mathbf{r}, t = 0) = \frac{Q^2 \operatorname{Re}^{\dot{\gamma}, d}}{16\pi} \left[\left(r^2 K_{\sim n}^2 K_0(rK_{\sim n}) - 3rK_{\sim n}K_1(rK_{\sim n}) \right) - \hat{r}_z^2 \left(r^2 K_{\sim n}^2 K_0(rK_{\sim n}) - 4rK_{\sim n}K_1(rK_{\sim n}) \right) - 4\hat{\mathbf{r}}_z^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K_{\sim n}K_{-l}^2}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^4} \left(2K_{\sim n}K_{-l}R(rK_{-l}) - 2K_{\sim n}^2 R(rK_{\sim n}) + (K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2) \left(r(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)K_1(rK_{\sim n}) - 4K_{\sim n}K_0(rK_{\sim n}) \right) \right) \right].$$
(5.121b)

Formal sind sich die beiden Koeffizienten ähnlich. Neben dem Vertauschen von symmetrischer und antisymmetrischer Wellenzahl ändert sich aber auch das rot hervorgehobene Vorzeichen beim dritten Ausdruck auf der rechten Seite. Die Nicht-Diagonale
inträge mit $n \neq m$ haben dagegen für den symmetrischen Fall die Lösung

$$\begin{aligned} \mathsf{S}_{1;(-nx)(-my)}(\mathbf{r},t=0) &= Q^2 \mathrm{Re}^{\dot{\gamma},d} \hat{r}_z^2 \frac{(-1)^{(n+m)}}{\pi} \sum_{l=1}^{\infty} K_{-n} K_{-m} K_{\sim l}^2 \bigg(\end{aligned} \tag{5.121c} \\ & \frac{K_{-n}}{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-n}^2 - K_{-m}^2)^2} R(rK_{-n}) \\ &+ \frac{K_{-m}}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2} \bigg(1 + \frac{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)}{(K_{-m}^2 - K_{-n}^2)^2} \bigg) R(rK_{-m}) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{K_{\sim l}}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2) (\bar{K}_{-nm}^2 - K_{\sim l}^2)} R(rK_{\sim l}) \\ &- 2 \frac{\bar{K}_{-nm}}{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-n}^2 - K_{-m}^2)^2} \end{aligned}$$

$$\left(1 + \frac{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2} - \frac{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)(\bar{K}_{-nm}^2 - K_{\sim l}^2)}\right) R(r\bar{K}_{-nm}) \right)$$

und im antisymmetrischen Fall ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathsf{S}_{1;(\sim nx)(\sim my)}(\mathbf{r} = d\,\mathbf{r}_{d}, t = 0) &= -Q^{2} \mathrm{Re}^{\dot{\gamma}, d} \hat{r}_{z}^{2} \frac{(-1)^{(n+m)}}{\pi} \sum_{l=1}^{\infty} K_{\sim n} K_{\sim m} K_{-l}^{2} \left(\qquad (5.121d) \right) \\ & \frac{K_{\sim n}}{(K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})^{2} (K_{\sim n}^{2} - K_{\sim m}^{2})^{2}} R(rK_{\sim n}) \\ & + \frac{K_{\sim m}}{(K_{\sim n}^{2} - K_{-l}^{2})^{2} (K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})^{2}} \left(1 + \frac{(K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})(K_{\sim n}^{2} - K_{-l}^{2})}{(K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})^{2}} \right) R(rK_{\sim m}) \\ & + \frac{1}{2} \frac{K_{-l}}{(K_{\sim n}^{2} - K_{-l}^{2})^{2} (K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})(\bar{K}_{\sim nm}^{2} - K_{-l}^{2})} R(rK_{-l}) \\ & - 2 \frac{\bar{K}_{\sim nm}}{(K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})^{2} (K_{\sim n}^{2} - K_{-m}^{2})^{2}} \\ & \left(1 + \frac{(K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})^{2}}{(K_{\sim n}^{2} - K_{-l}^{2})^{2}} - \frac{(K_{\sim m}^{2} - K_{-l}^{2})^{2}}{(K_{\sim nm}^{2} - K_{-l}^{2})} \right) R(r\bar{K}_{\sim nm}) \right). \end{aligned}$$

Hier ist neben dem Vertauschen der Wellenzahl der gesamte Ausdruck mit -1 zu multiplizieren, um aus den nichtdiagonalen symmetrischen Anteilen die antisymmetrischen Koeffizienten zu erhalten. In den Koeffizientengleichungen sind $K_{\nu}(X)$ und $I_{\nu}(X)$ wieder die in [66] beschriebenen "Modifizierten Besselfunktionen".

Diskussion

Die einzelnen durch die Elemente der Matrix $\underline{\mathbb{S}}_0(\mathbf{r})$ in Gleichung (5.103) gegebenen Entwicklungskoeffizienten $S_{0;(\alpha nx)(\beta mx)}(\mathbf{r})$ der Autokorrelation $S_{0;xx}(\mathbf{r},y)$ divergieren jeweils am gleichen Ort, wie es bereits im Abschnitt 5.4.4 diskutiert wurde. Die Entwicklungskoeffizienten $S_{1;(\alpha nx)(\beta ny)}(\mathbf{r})$ aus Gleichung (5.121), welche mit (5.71) die zur Scherrate g proportionalen Anteile der Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r},y)$ beschreiben, sind dagegen jeweils endlich. Für die gleiche y-Position, y = y', deutet sich auch für die Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r}, y = y' = 0)$, nach aufsummieren der Reihenglieder in Gleichung (5.71), eine Divergenz an.



Abb. 5.8: Der log-log-Plot bestätigt die 1/r-Abhängigkeit der Korrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r}, y = y' = 0)$ für kleine r aus der analytischen Rechnung für den unendlich ausgedehnten Fall, Gleichung (4.26) (durchgezogene Linien). Die Datenpunkte wurden durch die Gleichung (5.71) zusammen mit den Koeffizienten aus den Gleichungen (5.121) für zwei verschiedene Richtungen des Ortsvektors $\mathbf{r} \sim \hat{e}_x$ (rot) und $\mathbf{r} \sim \hat{e}_z$ (schwarz) bestimmt.

Die analytische Rechnung im vorherigen Kapitel, Gleichung (4.26), hat gezeigt, dass die Kreuzkorrelation im unendlich ausgedehnten Gefäß umgekehrt proportional zum Abstand $r = |\mathbf{r}|$ abfällt. Es ist also zu erwarten, dass man auch mit Wänden zum gleichen Resultat kommt, sofern die Abstände $|\mathbf{r}|$ klein im Vergleich zur Wanddistanz sind. In Abbildung 5.8 wurde daher der Logarithmus des Betrages der Korrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r}, y = y' = 0)$ für verschiedene Abstände r gegen den Logarithmus von r für y = y' = 0 aufgetragen und mit dem analytischen Ergebnis aus (4.26) verglichen. $S_{1;xy}(\mathbf{r}, y = y' = 0)$ wurde mit Hilfe der Summendarstellung aus Gleichung (5.71) und den Entwicklungskoeffizienten aus den Gleichungen (5.121) berechnet. Für kleine Abstände r stimmt die numerischemit der analytischen Lösung bezüglich der Abstandsabhängigkeit sehr gut überein. Für große Abstände, beginnend mit dem halben Plattenabstand $r \sim 1$, fällt die Kreuzkorrelation nach Abbildung 5.8 vom Betrag her schneller als $\frac{1}{r}$ ab.



Abb. 5.9: Skizze des Kanals.

Multipliziert man die Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r}, y = y' = 0)$ also mit dem Abstandsbetrag, wie im oberen Teil der Abbildung 5.10 dargestellt, so sollte das Resultat für kleine Abstände unabhängig von r sein. Dies ist in der inneren Abbildung im oberen Plot von 5.10 auch sehr gut zu erkennen. Die für kleinen r negative Korrelation, falls $\mathbf{r} \sim \hat{e}_x$ (•) ist, wächst für $r \sim 1$ zu größeren Werten an und wechselt schließlich in der Größenordnung des Plattenabstandes $r \sim 2$ das Vorzeichen. Die Korrelation ist für $\mathbf{r} \sim \hat{e}_z$ (\blacksquare) und kleinen r positiv und hat beim halben Plattenabstand $r \sim 1$ ein Maximum. Die in der Näherungsrechnung ermittelte Abhängigkeit vom Abstandsbetrag stimmt demnach innerhalb der Ebene senkrecht zu den Wänden sehr gut mit der analytischen Rechnung in Abschnitt 4.4 überein, so lange der Abstand r ein Achtel des Wandabstandes nicht überschreitet, $r/d \lesssim \frac{1}{8}$.

Um die Richtungsabhängigkeit der Ergebnisse mit der analytischen Näherungslösung (4.26) besser vergleichen zu können, muss die Abhängigkeit von y in eine Winkelabhängigkeit umgeschrieben werden. Liegt der ebene Abstandsvektor \mathbf{r} in der xy-Ebene, wie in Abbildung 5.9 links dargestellt, zeigt also in x-Richtung, dann erhält man den azimutalen Winkel durch $\Phi = \arctan\left(\frac{y-y_0}{r}\right)$. Auf dieselbe Art und Weise erhält man den Polaren Winkel Θ , sofern der Ortsvektor in z-Richtung zeigt, wie es in der rechten Skizze von Abbildung 5.9 dargestellt ist. Aufgrund des endlichen Plattenabstandes d tritt somit in Abhängigkeit von r nur ein begrenzter Bereich von $\Phi \in \left[\arctan\left(\frac{d-2y_0}{2r}\right), \arctan\left(\frac{-d-y_0}{2r}\right)\right]$ und analog für Θ auf, der für größer werdende r kleinere Ausschnitte für Φ und Θ abdeckt.

Neben der Winkelabhängigkeit haben die verschiedenen numerisch bestimmbaren Punkte (grüner Kreis auf der gestrichelten Linie in Abbildung 5.9) unterschiedliche räumliche Abstände \mathbf{r}' zum Bezugspunkt (roter Kreis). Wegen der zuvor diskutierten reziproken Abstandsabhängigkeit für kleine Abstände wurden die numerischen Werte innerhalb der xy-Ebene mit dem Betrag $r' = \frac{r}{\cos(\Phi)}$ und diejenige in der yz-Ebene mit $r' = \frac{r}{\cos(\Theta)}$, in Abhängigkeit von der betrachteten Position, multipliziert. Die Ergebnisse sind in der Abbildung 5.10 (unten) aufgetragen und stimmen für kleine r' innerhalb der xy-Ebene sehr gut und in der dazu senkrechten yz-Ebene bis auf Randeffekte gut mit der analytischen Näherungsrechnung (4.26) überein. Für größere r' ist das Minimum bei $\Phi = 0$ nicht mehr erkennbar.



Abb. 5.10: Oben: Die mit r multiplizierte Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r})$ aus den Gleichungen (5.71) und (5.121) als Funktion des Abstandes r für den Fall $\mathbf{r} = r\hat{e}_x$ (schwarze Kreise) und $\mathbf{r} = r\hat{e}_z$ (rote Quadrate) mit $y = y_0 = 0$ aufgetragen. Die Unterabbildung zeigt die Daten vergrößert für kleine Abstände r. Unten: Die Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(\mathbf{r})$ wurde hier mit dem auf Seite 112 definierten Abstand r' multipliziert, der dem räumlichen Ortsvektor in der analytischen Rechnung entspricht. Dargestellt ist die Abhängigkeit vom Winkel Φ , falls $\Theta = \pi/2$ (Kreise) und als Funktion des Winkels Θ , falls $\Phi = \pi/2$ (Quadrate), für die Abstände r = 0.02 (rot), r = 0.2 (schwarz) und r = 2.0 (grün). Die schwarzen Linien entsprechen den analytischen Resultaten aus (4.26).

Wählt man den Bezugspunkt $y_0 \neq 0$ in der Nähe einer Wand, so fällt die Kreuzkorrelation schneller ab, falls der Abstandsvektor \mathbf{r}' in Richtung dieser nahe gelegenen Wand zeigt, als es in die entgegengesetzte Richtung der Fall ist. Dies kann man anhand der Abbildung 5.11 erkennen. Liegt der Abstandsvektor \mathbf{r}' in der xy-Scherebene, so kann man bezüglich der Winkelabhängigkeit in dieser, der Wand entgegengesetzten Richtung nur wenig Unterschied zu dem Fall mit $y_0 = 0$ feststellen. Anders sieht es jedoch für den Abstandsvektor in der xz-Ebene aus. Dort findet sich eine stark ausgeprägte Korrelation mit Punkten in der Nähe der entfernten Wand.

Diese Korrelationsabhängigkeit ist noch besser in Abbildung 5.12 zu erkennen, in der die nicht mit r' multiplizierte Korrelation, als Funktion des Abstandes y, für drei verschiedene y_0 dargestellt wurde. Man befindet sich also auf den in den Skizzen 5.9 gestrichelt eingezeichneten Linien.

Für diese Randeffekte habe ich bisher keine einleuchtende Erklärung gefunden. Möglicherweise entstehen sie durch numerischen Fehler in der Berechnung oder dadurch, dass gerade die Randergebnisse wegen der zuvor beschriebenen Inkonsistenz der Entwicklungsfunktionen im Zusammenhang mit der Inkompressibilitätsbedingung, wie sie in Abschnitt 5.4.1 beschrieben wurde, zu falschen Ergebnissen führen können. Die reale Existenz dieser Effekte sollte daher zum einen durch eine andere, für Randeffekte geeigneterer Wahl für die Basisfunktionen und durch experimentelle Beobachtungen überprüft werden.

Einfluss auf ein Testteilchen

Es soll an dieser Stelle wieder die zuvor in Abschnitt 5.4.3 eingeführte Korrelation der über ein Volumen gemittelten Geschwindigkeitsfluktuationen betrachtet werden. Durch die Mittelung über $\hat{\kappa}$ verschwinden sowohl der Mittelwert der "- ~"- und "~ -"-Komponenten als auch die xz-Korrelation. Es genügt somit die xy-Komponente zu betrachten.

Reynoldszahl

Wenn die kollektiven Fluktuationen in einem Zylindervolumen betrachtet werden, kann man, wie schon bei der analytischen Rechnung in Abschnitt 4.2 für eine Kugel eingeführt, die Ergebnisse in Abhängigkeit einer anderen, als der zum Plattenabstand d bezogenen Reynoldszahl, die sich stattdessen auf den Zylinderradius \check{a} bezieht, darstellen. Mit der Wahl $L = \check{a}$ für die charakteristische Länge gilt dann

$$\frac{g}{\nu} = \operatorname{Re}^{\dot{\gamma}a} = \frac{\check{\gamma}\check{a}^2}{\check{\nu}}.$$
(5.122)

Zwischen den beiden Reynoldszahlen aus (5.122) und (5.119) besteht somit der folgende Zusammenhang:

$$\operatorname{Re}^{\dot{\gamma}a} = 4 \frac{\check{a}^2}{\check{d}^2} \operatorname{Re}^{\dot{\gamma}d}.$$
(5.123)



Abb. 5.11: Die mit dem Abstand r' (siehe Bechreibung auf Seite 112) multiplizierte Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(r, \Theta, \Phi, y_0)$ für verschiedene y_0 als Funktion des Winkels Φ in der xy-Ebene, $\Theta = \pi/2$, (negative Werte) und als Funktion des Winkels Θ in der yz-Ebene, $\Phi = 0$, (positive Werte) für den festen Abstand r = 0.1 geplottet. Die Korrelation wurde mit Hilfe der Gleichung (5.71) und den Koeffizienten (5.121) berechnet.



Abb. 5.12: Die Kreuzkorrelation $S_{1;xy}(r, y, y_0)$ für den festen Abstand r = 0.1 als Funktion von y für verschiedene y_0 in der xy-Ebene, $\Theta = \pi/2$, (negative Werte) und in der yz-Ebene, $\Phi = 0$, (positive Werte) geplottet. Die Korrelation wurde mit Hilfe der Gleichung (5.71) und den Koeffizienten (5.121) berechnet.

Koeffizientenmatrix

Die Lösung für die Entwicklungskoeffizienten sind im Folgenden aufgelistet.

$$\begin{split} \left[\left[\mathsf{S}_{1;(-nx)(-ny)}(t=0) \right] \right]_{A_Z} &= \frac{Q^2}{A_Z} \frac{\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{4} \left(I_0(K_{-n})K_0(K_{-n}) \right) \\ &+ \frac{2}{K_{-n}} \left(I_0(K_{-n})K_1(K_{-n}) - K_0(K_{-n})I_1(K_{-n}) \right) - \left(1 + \frac{4}{K_{-n}^2} \right) K_1(K_{-n})I_1(K_{-n}) \right) \\ &+ \frac{Q^2}{A_Z} \frac{4\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{d^2} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{K_{\sim l}^2}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2} \left(I_1(K_{-n})K_1(K_{-n}) - I_0(K_{-n})K_0(K_{-n}) \right) \right. \\ &- \frac{2}{(K_{-n})} \frac{K_{\sim l}^4}{(-K_{-n}^2 + K_{\sim l}^2)^3} \left(I_0(K_{-n})K_1(K_{-n}) - I_1(K_{-n})K_0(K_{-n}) \right) \\ &+ \frac{4\pi^2}{d^2} \frac{K_{\sim l}^2 K_{-n}^2}{(-K_{-n}^2 + K_{\sim l}^2)^4} \left(I_1(K_{\sim l})K_1(K_{\sim l}) - \left(\frac{K_{\sim l}^2}{K_{-n}^2} - \frac{K_{\sim l}^4}{K_{-n}^4} + 1 \right) I_1(K_{-n})K_1(K_{-n}) \right) \\ \end{split}$$

$$\begin{split} & \left[\left[\mathsf{S}_{1;(\sim nx)(\sim ny)}(t=0) \right] \right]_{A_{Z}} = \frac{Q^{2}}{A_{Z}} \frac{\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{4} \left(I_{0}(K_{\sim n})K_{0}(K_{\sim n}) \right) \\ & + \frac{2}{K_{\sim n}} \left(I_{0}(K_{\sim n})K_{1}(K_{\sim n}) - K_{0}(K_{\sim n})I_{1}(K_{\sim n}) \right) - \left(1 + \frac{4}{K_{\sim n}^{2}} \right) K_{1}(K_{\sim n})I_{1}(K_{\sim n}) \right) \\ & - \frac{Q^{2}}{A_{Z}} \frac{4\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{d^{2}} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{K_{-l}^{2}}{(K_{\sim n}^{2} - K_{-l}^{2})^{2}} \left(I_{1}(K_{\sim n})K_{1}(K_{\sim n}) - I_{0}(K_{\sim n})K_{0}(K_{\sim n}) \right) \right) \\ & - \frac{2}{(K_{\sim n})} \frac{K_{-l}^{4}}{(-K_{\sim n}^{2} + K_{-l}^{2})^{3}} \left(I_{0}(K_{\sim n})K_{1}(K_{\sim n}) - I_{1}(K_{\sim n})K_{0}(K_{\sim n}) \right) \\ & + \frac{4\pi^{2}}{d^{2}} \frac{K_{-l}^{2}K_{\sim n}^{2}}{(-K_{\sim n}^{2} + K_{-l}^{2})^{4}} \left(I_{1}(K_{-l})K_{1}(K_{-l}) - \left(\frac{K_{-l}^{2}}{K_{\sim n}^{2}} - \frac{K_{-l}^{4}}{K_{\sim n}^{4}} + 1 \right) I_{1}(K_{\sim n})K_{1}(K_{\sim n}) \right) \right], \end{split}$$

$$\begin{split} & \left[\left[\mathsf{S}_{1;(-nx)(-my)}(t=0) \right] \right]_{A_Z} = 8 \frac{Q^2}{A_Z} \frac{\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{d^2} (-1)^{(n+m)} \sum_{l=1}^{\infty} K_{\sim l}^2 K_{-m} K_{-n} \right] \tag{5.124c} \\ & - \frac{I_1(\bar{K}_{-nm}) K_1(\bar{K}_{-nm})}{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-n}^2 - K_{-m}^2)^2} \left(2 - \frac{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-n}^2 - K_{-m}^2)}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (\bar{K}_{-nm}^2 - K_{\sim l}^2)} \right) \\ & + \frac{I_1(K_{-m}) K_1(K_{-m})}{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-n}^2 - K_{-m}^2)^2} \left(1 - \frac{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2} \right) \\ & + \frac{I_1(K_{-n}\pi) K_1(K_{-n}\pi)}{(K_{-m}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-n}^2 - K_{-m}^2)^2} + \frac{1}{2} \frac{I_1(K_{\sim l}) K_1(K_{\sim l})}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2 (K_{-nm}^2 - K_{\sim l}^2)} \right], \end{split}$$

116

$$\begin{split} & \left[\left[\mathsf{S}_{1;(\sim nx)(\sim my)}(t=0) \right] \right]_{A_Z} = -8 \frac{Q^2}{A_Z} \frac{\operatorname{Re}^{\dot{\gamma},a}}{d^2} (-1)^{(n+m)} \sum_{l=1}^{\infty} K_{-l}^2 K_{\sim m} K_{\sim n} \right] \tag{5.124d} \\ & - \frac{I_1(\bar{K}_{\sim nm}) K_1(\bar{K}_{\sim nm})}{(K_{\sim m}^2 - K_{-l}^2)^2 (K_{\sim n}^2 - K_{\sim m}^2)^2} \left(2 - \frac{(K_{\sim m}^2 - K_{-l}^2)^2 (K_{\sim n}^2 - K_{\sim m}^2)}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2 (\bar{K}_{\sim nm}^2 - K_{-l}^2)} \right) \\ & + \frac{I_1(K_{\sim m}) K_1(K_{\sim m})}{(K_{\sim m}^2 - K_{-l}^2)^2 (K_{\sim n}^2 - K_{\sim m}^2)^2} \left(1 - \frac{(K_{\sim m}^2 - K_{-l}^2)(K_{\sim nm}^2 - K_{-l}^2)}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2} \right) \\ & + \frac{I_1(K_{\sim n}) K_1(K_{\sim n})}{(K_{\sim m}^2 - K_{-l}^2)^2 (K_{\sim n}^2 - K_{\sim m}^2)^2} + \frac{1}{2} \frac{I_1(K_{-l}) K_1(K_{-l})}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2 (K_{\sim nm}^2 - K_{-l}^2)} \right]. \end{split}$$

Diskussion



Abb. 5.13: Die über ein Zylindervolumen vom Radius a = 1 und der Höhe h = 2 gemittelte Korrelation $[[S_{1;xy}]]_{V_Z}$ an der Stelle $y_0 = 0$, als Funktion des reziproken Abstandes $\frac{1}{d}$ und geteilt durch die in Abschnitt 5.4.5 definierte Reynoldszahl Re^{$\dot{\gamma},a$} und Q^2/V_Z , aufgetragen (rote Rechtecke). Die Korrelation wurde durch Einsetzen der Koeffizienten (5.124) in die Gleichung (5.81) bestimmt. Die selbe Korrelation, jetzt jedoch relativ zu dem vom Plattenabstand abhängigen Wert für die Autokorrelation in x-Richtung $[[S_{0;xx}]]_{V_Z}$ aus Gleichung (5.106) dargestellt (schwarze Kreise). Die durchgezogenen Linien entsprechen einem linearen Fit für große Wandabstände und die Position der Nullstelle wurde durch die gepunktete Linie markiert.

Die numerisch berechnete Abhängigkeit der Kreuzkorrelation $[[S_{1;xy}(y_0 = 0)]]_{V_Z}$, der über ein Zylindervolumen gemittelten Geschwindigkeitsfluktuationen, wurde in der Abbildung 5.13 durch rote Quadrate als Funktion des reziproken Wandabstandes dargestellt. Die Korrelation wurde mit Hilfe der im letzten Abschnitt angegebenen Koeffizienten (5.124) und der Gleichung (5.81) bestimmt. Der Zylinder hat hierbei den Radius a = 1 und die Höhe h = 2, so dass für 1/d = 0.5 der Zylinder genau zwischen die Wände passt. Für große Plattenabstände, beziehungsweise kleine $\frac{1}{d} < 0.2$, ist der Verlauf der Kurve linear und ist somit proportional zum reziproken Plattenabstand d^{-1} , was durch die Fitgerade bestätigt wird. Die für kleine $\frac{1}{d}$ negative Funktion hat bei $\frac{1}{d} \simeq 0.26$ eine Nullstelle. Im Grenzfall unendlicher Plattenabstände $\frac{1}{d} \to 0$ würde man den bei der analytischen Rechnung in Abschnitt 4.2 aus der Gleichung (4.51) gewonnen Wert von 0.0267 erwarten. Durch den Schnittpunkt der roten Linie mit der Funktionsachse findet man in Abbildung 5.13 aber den davon verschiedenen Wert $\simeq 0.035$. Der Unterschied liegt wieder darin begründet, dass hier über ein Zylindervolumen und im Abschnitt 4.2 über ein Kugelvolumen integriert wurde. Zum Test kann die Integration in der Gleichung (4.51) auch numerisch über ein Zylindervolumen durchgeführt werden, wodurch sich ein Wert von 0.0354 ergibt, der mit der hier gefundenen Lösung für große Plattenabstände sehr gut übereinstimmt.

Die als schwarze Kreise gezeichneten Punkte in der Abbildung 5.13 zeigen das in (4.52) mit $(-\lambda)$ bezeichnete Verhältnis zwischen der über das Volumen gemittelten Kreuzkorrelation und der in einer ruhenden Flüssigkeit auftretenden Autokorrelation der Geschwindigkeits-fluktuation in x-Richtung,

$$\lambda := -\frac{[[S_{1;xy}]]_{V_Z}(a)}{[[S_{0;xx}]]_{V_Z}}, \qquad (5.125)$$

relativ zur Reynoldszahl Re^{$\dot{\gamma},a$} und als Funktion des inversen Plattenabstandes. Der Wert von $\simeq 0.051$ für unendlich große Plattenabstände, gegeben durch den Schnittpunkt der schwarzen Linie mit der Funktionenachse in Abbildung 5.13, unterscheidet sich nur wenig von dem in [39] dargestellte Wert von $\simeq 0.65$ im Zentrum des Kanals. Dies ist überraschend, da der Wert dort durch direkte numerische Simulation der Gleichungen, also ohne Entwicklung nach der Scherrate, für den Fall g = 1 ermittelt wurde. Hinzu kommt, dass die Simulation in [39] auf einem Gitter durchgeführt wurde und dadurch das betrachtete Volumen ein Quader ist, so dass wie durch den Wechsel von Kugel- zu Zylindervolumen ohnehin eine Abweichung zu erwarten ist. Dies zeigt, dass die hier gefundenen Lösungen in linearer Ordnung der Scherrate auch in der analytischen Rechnung bereits sehr gute Ergebnisse liefern.

In Abbildung 5.14 wurde für feste Wanddistanzen d die Abhängigkeit der Kreuzkorrelation $[[S_{1;xy}]]_{V_Z}$ von der Position $y_0/(d/2)$ dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Korrelationen Minima in der Nähe der Wände aufzeigen, an denen sie vom Betrag her größer sind, als es im Zentrum der Fall ist. Der Abstand dieser Minima von der Wand wächst mit abnehmendem Plattenabstand d, während der Betrag der Kreuzkorrelation, wie im Abschnitt zuvor besprochen, abklingt und zwar im Zentrum schneller als an den Minimalpositionen. Das Verhältnis der Werte an den Minima zu denen im Zentrum wächst demnach mit wachsenden $\frac{1}{d}$, beziehungsweise kleiner werdenden Abständen. Während im Kanalzentrum ähnliche Werte wie in [39] gefunden wurden, unterscheiden sich die Profile über den Kanalquerschnitt hiervon. Ursache kann abermals die durch die gewählten Entwicklungsfunktionen unerfüllte Randbedingung (2.20) sein. (siehe hierzu auch die Erläuterungen auf Seite 88).



Abb. 5.14: Die über ein Zylindervolumen vom Radius a = 1 und der Höhe h = 2 gemittelte Korrelation $[[S_{1;xy}]]_{V_Z}$ als Funktion von $y_0/(d/2)$ und geteilt durch die in Abschnitt 5.4.5 definierte Reynoldszahl Re^{$\dot{\gamma},a$} und die Konstante Q^2/V_Z . Die Korrelation wurde durch Einsetzen der Koeffizienten (5.124) in die Gleichung (5.81) berechnet und für die Abstände d = 100 (durchgezogenen Linie), d = 33.3 (gestrichelte Linie), d = 20 (gestrichpunktete Linie) und d = 10 (gepunktete Linie) aufgetragen.

5.4.6 Quadratische Scherratenabhängigkeit

Der Anteil der spektralen Dichte in der 2. Ordnung in $g, \underline{\mathbb{S}}_2(\kappa, \omega)$, ist gegeben durch Gleichung (5.64b). Die Berechnung vereinfacht sich, wenn die Matrix wieder durch zwei zueinander adjungierte Matrizen wie folgt dargestellt wird:

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\right)^{\dagger}, \qquad (5.126)$$

mit

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = -\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) \right)^{\dagger} \right).$$
(5.127)

Für die in der Zeit zurücktransformierte Lösung gilt dann nach (C.9)

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}(\boldsymbol{\kappa},t) = \underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t) + \left(\underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},-t)\right)^{\dagger}.$$
(5.128)

Es genügt somit die Rücktransformierte $\underline{S}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ zu bestimmen, die durch das folgende Faltungsintegral gegeben ist:

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},t) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ \underline{\mathcal{B}}(t-\tau,\boldsymbol{\kappa}) \Big(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau,\boldsymbol{\kappa}) + \frac{1}{2} \big(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau),\boldsymbol{\kappa})\big)^{\dagger}\Big).$$
(5.129)

119

Die semianalytische Berechnung der Lösung für den Fall mit Wänden ist bereits für den statischen Fall sehr umfangreich und soll hier nicht weiter durchgeführt werden. Ihre allgemeine Form, unter Einbezug der Kompressibilität ist jedoch in Abschnitt 5.5.3 angegeben und eine Diskussion der genäherten Ergebnisse für große Wandabstände findet sich in der analytischen Rechnung in Kapitel 4.

5.5 Verallgemeinerung für kompressible Flüssigkeiten

Für kompressible Flüssigkeiten werden die Beiträge für die transversalen Geschwindigkeitsfluktuationen aus dem Abschnitt zuvor wieder um die longitudinale Geschwindigkeitund die Dichtefluktuationen ergänzt. Wie in den Ausgangsgleichungen (5.1c) oder der dazu äquivalenten Matrixgleichung (5.12) in Abschnitt 5.1.2 zu erkennen ist, treten neben der Kopplung zwischen der Dichte und der longitudinalen Geschwindigkeit im Scherfluss außerdem Kopplungen zwischen longitudinalen- und transversalen Geschwindigkeiten auf. Insbesondere ist der Matrixoperator $\underline{\mathcal{M}}_0$ aus (5.9), welcher die Fluktuationen einer im Mittel ruhenden Flüssigkeit beschreibt, nicht mehr diagonal, was den Aufwand der weiteren Rechnung erheblich erhöht. Es sollen daher an dieser Stelle nur formal die zeitabhängigen und statischen Lösungen genannt werden. Diese lassen sich in der dargestellten Form aber problemlos in einer Mathematiksoftware, wie zum Beispiel Maple [67], implementieren, wobei die Bestimmung einer einzelnen Mode bereits sehr viel Zeit in Anspruch nehmen kann.

Führt man wiederum eine Fouriertransformation in der xz-Ebene durch und entwickelt anschließend die Fluktuationen in dem Funktionensystem, wie es im Abschnitt 5.4.1 besprochen wurde, so ergeben sich die im Anhang E.1 aufgeführten Matrizen, mit denen die Bewegungsgleichung für die Fluktuationen im Scherfluss die Form (5.28) annimmt. Nach einer Multiplikation mit \mathcal{J}^{-1} erhält man dann die folgenden Matrixgleichung für die Entwicklungskoeffizienten $\mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ der Fluktuationen

$$\left(\underline{\mathbb{I}}\partial_t + \underline{\mathbb{L}}(\boldsymbol{\kappa})\right) \mathbb{X}(\boldsymbol{\kappa}, t) = \mathbb{F}(\boldsymbol{\kappa}, t),$$

mit $\underline{\mathbb{L}}(\kappa) = \underline{\mathbb{A}}(\kappa) + \underline{g}\underline{\mathbb{B}}(\kappa)$ und den in Abschnitt E.2 aufgelisteten Matrizen $\underline{\mathbb{A}}(\kappa)$ und $\underline{\mathbb{B}}(\kappa)$. Die allgemeine Lösung dieser Gleichungen für die spektrale Dichtematrix $\underline{\mathbb{S}}(\kappa, \omega)$ ist in Gleichung (5.65) mit den Beiträgen (5.64) gegeben.

Da die Matrix $\underline{\mathbb{A}}(\boldsymbol{\kappa})$ im Gegensatz zum Fall der Inkompressibilität hier keine Diagonalgestalt hat und somit die Eigenwerte nicht unmittelbar gegeben sind, verkompliziert sich die Berechnung der Faltungsintegrale, die sich bei der Rücktransformation der Beiträge $\underline{\mathbb{S}}_0(\boldsymbol{\kappa},\omega)$, $\underline{\mathbb{S}}_1(\boldsymbol{\kappa},\omega)$ und $\underline{\mathbb{S}}_2(\boldsymbol{\kappa},\omega)$ aus (5.64) ergeben. Hierzu wurde im Anhang C.2.1 eine allgemeine Betrachtung der Lösung von speziellen Faltungsintegralen durchgeführt und es wurden verschiedene Tensoren eingeführt, die eine geschlossene Darstellung ihrer Lösung ermöglichen.

5.5.1 Diagonalisieren der Lösungsmatrizen

Mit Hilfe der folgenden Definitionen,

$$\beta_{l,-N} := \frac{1}{2} \nu \alpha M_{-N}^2, \qquad \beta_{l,\sim N} := \frac{1}{2} \nu \alpha M_{\sim N}^2, \\
\beta_{t,-N} := \frac{1}{2} \nu M_{-N}^2, \qquad \beta_{t,\sim N} := \frac{1}{2} \nu M_{\sim N}^2, \\
\Omega_{-N} := \sqrt{c^2 M_{-N}^2 - \beta_{l,-N}^2}, \qquad \Omega_{\sim N} := \sqrt{c^2 M_{\sim N}^2 - \beta_{l,\sim N}^2}, \quad (5.130)$$

lassen sich die Untermatrizen von A aus (E.18) wie folgt schreiben:

$$\mathbb{A}_{(\alpha N)(\gamma L)} = \delta_{\alpha \gamma} \delta_{NL} \begin{pmatrix} 0 & \frac{i}{\kappa} M_{\alpha N}^2 & 0 & 0 & 0\\ \frac{i\kappa}{M_{\alpha N}^2} (\beta_{l,\alpha N}^2 + \Omega_{\alpha N}^2) & 2\beta_{l,\alpha N} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 2\beta_{t,\alpha N} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 2\beta_{t,\alpha N} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\beta_{t,\alpha N} \end{pmatrix}, \quad (5.131)$$

Eigenwerte. Die symmetrischen und antisymmetrischen Eigenwerte $a_{(-Ni)}$ und $a_{(\sim Ni)}$ von <u>A</u> sind dann gegeben durch

$$a_{(-N1)} = \beta_{l,-N} + i\Omega_{-N}, \qquad a_{(-N2)} = \beta_{l,-N} - i\Omega_{-N}, \qquad a_{(-N3)} = 2\beta_{t,-N}, a_{(\sim N1)} = \beta_{l,\sim N} + i\Omega_{\sim N}, \qquad a_{(\sim N2)} = \beta_{l,\sim N} - i\Omega_{\sim N}, \qquad a_{(\sim N3)} = 2\beta_{t,\sim N},$$
(5.132)

wobei die zu den transversalen Komponenten gehörigen Eigenwerte $a_{(-N3)}$ und $a_{(\sim N3)}$ jeweils dreifach entartet sind $(a_{(\nu N4)} = a_{(\nu N5)} = a_{(\nu N3)})$.

Eigenvektoren und Transformationsmatrix. Mit Hilfe einer Hauptachsentransformation findet man die Transformationsmatrix $\underline{\mathbb{Q}}$, mit deren Hilfe sich die Matrix $\underline{\mathbb{A}}$ in die Diagonalmatrix $\underline{\mathbb{A}}_d$, mit den Eigenwerten a_k aus (5.132) auf der Diagonalen, überführen lässt:

$$\underline{\mathbb{A}}_{d} = \underline{\mathbb{Q}}^{-1} \underline{\mathbb{A}} \underline{\mathbb{Q}} . \tag{5.133}$$

Unter Verwendung der Definitionen (5.130) haben die einzelnen Untermatrizen von $\underline{\mathbb{Q}}$ die folgende Gestalt:

$$\underline{\mathbb{Q}}_{(\alpha N)(\gamma M)} = \delta_{\alpha \gamma} \delta_{NM} \begin{pmatrix} \frac{i}{\kappa} M_{\alpha N}^2 & \frac{i}{\kappa} M_{\alpha N}^2 & 0 & 0 & 0\\ \beta_{l,\alpha N} + i\Omega_{\alpha N} & \beta_{l,\alpha N} - i\Omega_{\alpha N} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$
(5.134)

Die zu $\underline{\mathbb{Q}}$ inverse Matrix lässt sich aus den folgenden Untermatrizen zusammensetzen:

$$\left(\underline{\mathbb{Q}}^{-1}\right)_{(\alpha N)(\gamma M)} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{NM} \begin{pmatrix} (\beta_{l,\alpha N} - i\Omega_{\alpha N})\frac{\kappa}{2\Omega_{\alpha N}M_{\alpha N}^{2}} & -\frac{i}{2\Omega_{\alpha N}} & 0 & 0 & 0\\ -(\beta_{\alpha N} + i\Omega_{\alpha N})\frac{\kappa}{2\Omega_{\alpha N}M_{\alpha N}^{2}} & \frac{i}{2\Omega_{\alpha N}} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

$$(5.135)$$

5.5.2 Darstellung durch Faltungstensoren

Die in C.3 allgemein hergeleiteten Tensoren, die Lösungen von speziellen Faltungsintegralen beschreiben, tauchen bei der Berechnung der Korrelationen auf zwei verschiedenen Arten auf, zum einen als $\underline{\underline{T}}^{AA^{\dagger}}$ und zum anderen als $\underline{\underline{T}}^{A(-A)}$. Es soll nun die spezielle Struktur davon, unter Berücksichtigung der bekannten Form der Matrizen $\underline{\underline{A}}$ und $\underline{\underline{\mathbb{Q}}}$ berechnet werden.

Mit $\underline{V} = \underline{\mathbb{A}}$ und $\underline{W} = \underline{\mathbb{A}}^{\dagger}$ gilt für die in C.3 eingeführte Transformationsmatrix $\underline{P} = \underline{\mathbb{Q}}^{-\dagger}$, so dass $\underline{\mathbb{A}}^{\dagger} = (\underline{\mathbb{Q}} \underline{\mathbb{A}}_{d} \underline{\mathbb{Q}}^{-1})^{\dagger} = \underline{\mathbb{Q}}^{-\dagger} \underline{\mathbb{A}}_{d} \underline{\mathbb{Q}}^{\dagger}$ ist. Die Komponenten $Q_{(\nu Nn)(\rho Rr)}$ und $\overline{Q}_{(\nu Nn)(\rho Rr)}^{-1}$ besitzen die Eigenschaft, dass sie nur Einträge ungleich Null besitzen, falls $\nu = \rho$ und N = R gilt:

$$Q_{(\nu Nn)(\rho Rr)} = \delta_{\nu\rho} \delta_{NR} Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)} , \qquad (5.136)$$

so dass die Faltungstensoren, falls $a_{(\nu Nr)} + a^*_{(\mu Mb)} \neq 0$ gilt, die folgende Form haben

$$T_{e;(\nu Nn)(\mu Mm)(\kappa Kk)(\lambda Ll)}^{AA^{\dagger}} :=$$

$$-Q_{(\nu Nn)(\rho Rr)}Q_{(\rho Rr)(\lambda Ll)}^{-1}$$

$$Q_{(\kappa Kk)(\beta Bb)}^{-\dagger}Q_{(\beta Bb)(\mu Mm)}^{\dagger}(a_{(\rho Rr)} + a_{(\beta Bb)}^{*})^{-1}$$

$$= -\delta_{\nu\alpha}\delta_{NA}\delta_{\alpha\lambda}\delta_{AL}Q_{(\nu Nn)(\rho Rr)}Q_{(\rho Rr)(\lambda Ll)}^{-1}$$

$$\delta_{\kappa\beta}\delta_{KB}\delta_{\beta\mu}\delta_{BM}Q_{(\kappa Kk)(\beta Bb)}^{-\dagger}Q_{(\beta Bb)(\mu Mm)}^{\dagger}(a_{(\rho Rr)} + a_{(\beta Bb)}^{*})^{-1}$$

$$= -\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}(a_{(\nu Nr)} + a_{(\mu Mb)}^{*})^{-1}$$

$$Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)}Q_{(\nu Nr)(\nu Nl)}^{-1}Q_{(\mu Mk)(\mu Mb)}Q_{(\mu Mb)(\mu Mm)}^{\dagger}$$
(5.137)

und für $a_{(\nu Nr)} \neq a_{(\mu Mb)}$ ergibt sich

$$T_{e;(\nu Nn)(\mu Mm)(\kappa Kk)(\lambda Ll)}^{A(-A)} :=$$

$$-Q_{(\nu Nn)(\rho Rr)}Q_{(\rho Rr)(\lambda Ll)}^{-1}$$

$$Q_{(\kappa Kk)(\beta Bb)}Q_{(\beta Bb)(\mu Mm)}^{-1}(a_{(\rho Rr)} - a_{(\beta Bb)})^{-1}$$

$$= -\delta_{\nu\alpha}\delta_{NA}\delta_{\alpha\lambda}\delta_{AL}Q_{(\nu Nn)(\rho Rr)}Q_{(\rho Rr)(\lambda Ll)}^{-1}$$

$$\delta_{\kappa\beta}\delta_{KB}\delta_{\beta\mu}\delta_{BM}Q_{(\kappa Kk)(\beta Bb)}Q_{(\beta Bb)(\mu Mm)}^{-1}(a_{(\rho Rr)} - a_{(\beta Bb)})^{-1}$$

$$= -\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}(a_{(\nu Nr)} - a_{(\mu Mb)})^{-1}$$

$$Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)}Q_{(\nu Nr)(\nu Nl)}^{-1}Q_{(\mu Mk)(\mu Mb)}Q_{(\mu Mb)(\mu Mm)}^{-1}.$$
(5.138)

Analog findet man nach Gleichung (C.30) für $a_{(\nu Nr)} + a^*_{(\mu Mb)} \neq 0$ die Darstellung

$$T_{e2;(\nu Nn)(\mu Mm)(\kappa Kk)(\lambda Ll)}^{AA^{\dagger}} := -\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}(a_{(\nu Nr)} + a_{(\mu Mb)}^{*})^{-2} Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)}Q_{(\nu Nr)(\nu Nl)}^{-1}Q_{(\mu Mk)(\mu Mb)}^{\dagger}Q_{(\mu Mb)(\mu Mm)}^{\dagger}$$
(5.139)

und für $a_{(\nu Nr)} \neq a_{(\mu Mb)}$ entsprechend

$$T_{e;(\nu Nn)(\mu Mm)(\kappa Kk)(\lambda Ll)}^{A(-A)} := -\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}(a_{(\nu Nr)} - a_{(\mu Mb)})^{-2} Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)}Q_{(\nu Nr)(\nu Nl)}^{-1}Q_{(\mu Mk)(\mu Mb)}Q_{(\mu Mb)(\mu Mm)}^{-1}.$$
(5.140)

In allen anderen Fällen verschwinden die Elemente.

Gilt hingegen $a_{(\nu Nr)} + a^*_{(\mu Mb)} = 0$, so erhält man die von Null verschiedenen Elemente

$$T_{t;(\nu Nn)(\mu Mm)(\kappa Kk)(\lambda Ll)}^{AA^{\dagger}} := -\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}$$

$$Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)}Q_{(\nu Nr)(\nu Nl)}^{-1}Q_{(\mu Mk)(\mu Mb)}^{\dagger}Q_{(\mu Mb)(\mu Mm)}^{\dagger}$$
(5.141)

und mit $a_{(\nu Nr)} = a_{(\mu Mb)}$ gilt

$$T_{t;(\nu Nn)(\mu Mm)(\kappa Kk)(\lambda Ll)}^{A(-A)} := -\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}$$

$$Q_{(\nu Nn)(\nu Nr)}Q_{(\nu Nr)(\nu Nl)}^{-1}Q_{(\mu Mk)(\mu Mb)}Q_{(\mu Mb)(\mu Mm)}^{-1}.$$
(5.142)

Transversale Beiträge. Die verschiedenen Unterblöcke der Faltungstensoren, die die rein longitudinalen, rein transversalen und die Zeitentwicklung der gemischten Koeffizienten beschreiben, müssen für jede Mode aus den Gleichungen (5.137) und (5.138) bestimmt werden. Für die Zeitentwicklung der rein transversalen Komponenten lassen sich wie im Folgenden gezeigt noch einige Vereinfachungen durchführen. Beschränkt man sich also auf den inkompressiblen Fall mit $n, m \in \{v_x^t, v_y^t, v_z^t\}$, so ergibt sich

$$T_{e;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{AA^{\dagger}} = -\frac{\delta_{\nu\lambda}\delta_{NL}\delta_{\mu\kappa}\delta_{MK}\delta_{nl}\delta_{mk}}{a_{(\nu N3)} + a_{(\mu M3)}^*}$$
(5.143)

und da $a_{(\nu N3)}=2\beta_{t,\nu N}$ und $a^*_{(\mu M3)}=2\beta_{t,\mu M}$ sind, erhält man schließlich den vereinfachten Ausdruck

$$T_{e;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\kappa K k)(\lambda,L,l)}^{AA^{\dagger}} = -\frac{1}{2} \frac{\delta_{\nu\lambda} \delta_{NL} \delta_{nl} \delta_{\mu\kappa} \delta_{MK} \delta_{mk}}{\beta_{t,\nu N} + \beta_{t,\mu M}}$$
(5.144)

und analog

$$T_{e2;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{AA^{\dagger}} = -\frac{1}{4} \frac{\delta_{\nu\lambda} \delta_{NL} \delta_{nl} \delta_{\mu\kappa} \delta_{MK} \delta_{mk}}{\left(\beta_{t,\nu N} + \beta_{t,\mu M}\right)^2} \,. \tag{5.145}$$

Da die Eigenwerte nicht rein imaginär sind, gilt außerdem

$$T_{t;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{AA^{\dagger}} = 0.$$
(5.146)

Handelt es sich um die gleiche Mode, das heißt $\nu = \mu$ und N = M, dann stimmen die Eigenwerte für alle transversalen Komponenten überein, und man erhält

$$T_{e;(\nu N v_n^t)(\nu N v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{A(-A^{\dagger})} = T_{e2;(\nu N v_n^t)(\nu N v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{A(-A^{\dagger})} = 0, \qquad (5.147)$$

aber

$$T^{A(-A^{\dagger})}_{t;(\nu N v_n^t)(\nu N v_m^t)(\lambda L v_l^t)(\kappa K v_k^t)} = \delta_{\nu\lambda} \delta_{NL} \delta_{nl} \delta_{\nu\kappa} \delta_{NK} \delta_{mk} \,.$$
(5.148)

Für verschiedene Moden $\nu \neq \mu$ oder $N \neq M$ gilt entsprechend

$$T_{e;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{A(-A^{\dagger})} = -\frac{1}{2} \frac{\delta_{\nu\lambda} \delta_{NL} \delta_{nl} \delta_{\mu\kappa} \delta_{MK} \delta_{mk}}{\beta_{t,\nu,N} - \beta_{t,\mu,M}}$$
$$T_{e2;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\kappa K k)(\lambda L l)}^{A(-A^{\dagger})} = -\frac{1}{4} \frac{\delta_{\nu\lambda} \delta_{NL} \delta_{nl} \delta_{\mu\kappa} \delta_{MK} \delta_{mk}}{\left(\beta_{t,\nu N} - \beta_{t,\mu M}\right)^2}$$
(5.149)

und

$$T_{t;(\nu N v_n^t)(\mu M v_m^t)(\lambda L v_l^t)(\kappa K v_k^t)}^{A(-A^{\dagger})} = 0$$
(5.150)

5.5.3 Zeitdarstellung

Die explizite Zeitdarstellung und deren statischer Grenzfall t = 0 soll im Folgenden formal für die Beiträge der verschiedenen Ordnungen in g aufgelistet werden. Der besseren Lesbarkeit wegen, werden die Matrizen <u>A</u> als <u>A</u> beschrieben, die nicht zu verwechseln sind mit den in Kapitel 4.2 eingeführten, gleichnamigen Matrizen. Ausserdem wird die Abhängigkeit der Matrizen vom ebenen Wellenzahlvektor κ nicht angegeben.

g^0 -Beitrag

Nach einer Rücktransformation der Gleichung (5.61) ergibt sich das folgende Integral für die Fluktuationen in einer makroskopisch ruhende Flüssigkeit,

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(t) = \int_{\max(0,t)}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{A}\tau} \underline{\mathbb{K}}_{S} e^{\underline{A}^{\dagger}(t-\tau)} , \qquad (5.151)$$

mit der in der Zeit symmetrischen Lösung

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(t,\kappa) = \Theta(t) \left[-e^{-\underline{A}t} \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \underline{\mathbb{K}}_{S} \right] + \Theta(-t) \left[-\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \underline{\mathbb{K}}_{S} e^{\underline{A}^{\dagger}t} \right],$$
(5.152)

womit im statischen Grenzfall $(t \to 0)$ die Korrelation wie folgt gegeben ist:

$$\underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0,\kappa) = -\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\underline{\mathbb{K}}_{S}.$$
(5.153)

g^1 -Beitrag

Die Matrix $\underline{S}_1(\kappa, \omega)$, welche die lineare Ordnung in der Scherrate g beschreibt lässt sich in zwei zueinander adjungierte Anteile aufspalten,

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + [\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega)]^{\dagger},$$

 mit

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = -\underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega)\underline{\mathbb{S}}_{0}(\boldsymbol{\kappa},\omega).$$
(5.154)

Nach einer Rücktransformation in die Zeit ergibt sich hierfür die Integraldarstellung

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(t) = -\Theta(t) \left[\int_{0}^{t} d\tau \ e^{-\underline{A}\tau} \ \underline{\mathcal{B}} e^{-\underline{A}(t-\tau)} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) + \int_{t}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{A}\tau} \ \underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) e^{\underline{A}^{\dagger}(t-\tau)} \right] - \Theta(-t) \int_{0}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{A}\tau} \ \underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) e^{\underline{A}^{\dagger}(t-\tau)} .$$
(5.155)

Führt man die Integrale mit Hilfe der Regel (C.27) aus, erhält man die in der Zeit unsymmetrische Lösung

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(t) = \Theta(t) \Big[e^{-\underline{A}t} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} (\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0)) - (\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}}) \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) \right) \\ + \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}} \right) e^{-\underline{A}t} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) - t (\underline{\underline{T}}_{t}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}}) e^{-\underline{A}t} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) \Big] \\ + \Theta(-t) \big[\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} (\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0)) e^{\underline{A}^{\dagger}t} \big] .$$
(5.156)

Nutzt man des weiteren die Eigenschaften der Faltungstensoren aus Abschnitt (C.3.1), vereinfacht sich dies zu

$$[\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-t)]^{\dagger} = \Theta(-t) \left[\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0)\underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) + \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})}\underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right) e^{\underline{A}^{\dagger}t} - \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) e^{\underline{A}^{\dagger}t} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})}\underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) + t \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) e^{\underline{A}^{\dagger}t} \left(\underline{\underline{T}}_{t}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})}\underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right] + \Theta(t) \left[e^{-\underline{A}t} \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0)\underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right].$$
(5.157)

Die Gesamtlösung ergibt sich schließlich aus der Summe

$$\underline{\mathbb{S}}_1(t) = \underline{\mathbb{S}}_1^h(t) + [\underline{\mathbb{S}}_1^h(-t)]^{\dagger}, \qquad (5.158)$$

womit die gleichzeitige Korrelation (t = 0) durch

$$\underline{\mathbb{S}}_{1}(t=0) = \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) + \underline{\mathbb{S}}_{0}(t=0) \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right)$$
(5.159)

gegeben ist.

g^2 -Beitrag

Auch die Beiträge der zweiten Ordnung in glassen sich durch zwei zueinander adjungierte Matrizen,

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + [\underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega)]^{\dagger},$$

126

darstellen, wobei mit Hilfe der Definition (5.154) die Beziehung

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) = \underline{\mathcal{B}}(\boldsymbol{\kappa},\omega) \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega) + \frac{1}{2} [\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\boldsymbol{\kappa},\omega)]^{\dagger} \right)$$
(5.160)

gilt. Eine Rücktransformation in die Zeit liefert dann die Faltungsintegrale

$$\begin{split} \underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(t) &= -\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ \underline{\mathcal{B}}\left(t-\tau\right) \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau)\right)\right)^{\dagger}\right) \\ &= -\int_{0}^{\infty} d\tau \ \Theta(t-\tau) e^{-\underline{A}(t-\tau)} \ \underline{\mathcal{B}}\left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau)\right)\right)^{\dagger}\right) \\ &- \int_{-\infty}^{0} d\tau \ \Theta(t-\tau) e^{-\underline{A}(t-\tau)} \ \underline{\mathcal{B}}\left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau)\right)\right)^{\dagger}\right) \\ &= -\Theta(t) \left[\int_{0}^{t} d\tau \ e^{-\underline{A}(t-\tau)} \ \underline{\mathcal{B}}\left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau)\right)\right)^{\dagger}\right) \\ &+ \int_{-\infty}^{0} d\tau \ e^{-\underline{A}(t-\tau)} \ \underline{\mathcal{B}}\left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau)\right)\right)^{\dagger}\right) \\ &- \Theta(-t) \int_{-\infty}^{t} d\tau \ e^{-\underline{A}(t-\tau)} \ \underline{\mathcal{B}}\left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(\tau) + \frac{1}{2} \left(\underline{\mathbb{S}}_{1}^{h}(-\tau)\right)\right)^{\dagger}\right), \end{split}$$
(5.161)

mit der gleichzeitigen Lösung

$$\begin{split} \underline{\mathbb{S}}_{2}^{h}(t=0) &= -\int_{0}^{\infty} d\tau \ e^{-\underline{A}\tau} \ \underline{\mathcal{B}}\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\left(\underline{\mathcal{B}}\underline{\mathbb{S}}_{0}+\frac{1}{2}\underline{\mathbb{S}}_{0}\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right)+\frac{1}{2}\underline{\mathbb{S}}_{0}\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}}(-A^{\dagger})\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right)\right) \\ &\quad -\frac{1}{2}e^{-\underline{A}\tau} \ \underline{\mathcal{B}}\underline{\mathbb{S}}_{0}e^{-\underline{A}^{\dagger}\tau}\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}}(-A^{\dagger})\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right) \\ &\quad -\frac{\tau}{2}e^{-\underline{A}\tau} \ \underline{\mathcal{B}}\underline{\mathbb{S}}_{0}e^{-\underline{A}^{\dagger}\tau}\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}}(-A^{\dagger})\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right) \\ &\quad =\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\left(\underline{\mathcal{B}}\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\left(\underline{\mathcal{B}}\underline{\mathbb{S}}_{0}+\frac{1}{2}\underline{\mathbb{S}}_{0}\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}+\frac{1}{2}\underline{\mathbb{S}}_{0}\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}}(-A^{\dagger})\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right)\right)\right) \\ &\quad -\frac{1}{2}\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\left(\underline{\mathcal{B}}\underline{\mathbb{S}}_{0}\right)\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}}(-A^{\dagger})\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right)-\frac{1}{2}\left(\underline{\underline{T}}_{e2}^{AA^{\dagger}}\left(\underline{\mathcal{B}}\underline{\mathbb{S}}_{0}\right)\right)\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}}(-A^{\dagger})\underline{\mathcal{B}}^{\dagger}\right). \end{split}$$

Somit erhält man für den in g quadratischen Beitrag zur Korrelation der Fluktuationen

insgesamt die statische Lösung

$$\underline{\mathbb{S}}_{2}(t=0) = \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right) \right) + \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}} (-A^{\dagger}) \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right) \\ + \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \right) \right) \right) \\ - \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \right) \right) \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) - \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{T}}_{e2}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \right) \right) \left(\underline{\underline{T}}_{t}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \\ + \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathcal{B}} \underline{\mathbb{S}}_{0} \right) \right) \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) - \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}} \right) \underline{\mathbb{S}}_{0} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) + \\ \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right) + \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}} \right) \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right) \\ + \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}} \right) \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)} \underline{\mathcal{B}} \right) \left(\underline{\underline{T}}_{e2}^{AA^{\dagger}} \left(\underline{\mathbb{S}}_{0} \underline{\mathcal{B}}^{\dagger} \right) \right).$$
(5.162)

Zusammenfassung und Ausblick

Die Arbeit befasst sich mit der Dynamik einzelner und mehrerer Polymere, welche in einer Scherströmung festgehalten werden. Einer Streckung der Polymere durch die externe Strömung wirken thermische stochastische Kräfte entgegen. Diese werden für eine Potentialströmung wie für ein Polymer im thermischen Gleichgewicht über das Fluktuations-Dissipations Theorem aus der Temperatur des Lösungsmittels und der von der Viskosität des Lösungsmittels abhängenden Mobilitätsmatrix bestimmt. Letztere beschreibt neben der Mobilität einzelner Polymere auch ihre Wechselwirkung untereinander über das Lösungsmittel, die sogenannte hydrodynamische Wechselwirkung. Der Hauptteil der Arbeit befasst sich mit der Änderung dieser stochastischen Kräfte als Funktion der Scherrate und im Vergleich zum Fall des Lösungsmittels im thermischen Gleichgewicht. Werden mehrere Polymere in einer Scherströmung festgehalten, so sind diese gewöhnlich unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten ausgesetzt. Welche Auswirkung dies auf die Auslenkung der Polymere und deren Dynamik haben kann, wurde anhand eines einfachen Modells, in dem ein Polymer durch eine an einer harmonischen Feder festgehaltene Kugel ersetzt wird, untersucht.

Der erste Teil der Arbeit beschäftigt sich daher mit rein deterministischen Effekten von einfachen, über das Lösungsmittel durch den sogenannten Rotne-Prager Tensor wechselwirkenden Punktteilchen mit effektiven Reibungskoeffizienten in einer Scherströmung. Dabei wurde ein aus drei Kugeln bestehendes Modell benutzt, bei dem jede Kugel durch eine harmonische Feder an verschiedenen Positionen festgehalten wird. Die Haltepositionen liegen dabei in einer Ebene senkrecht zu den Strömungslinien der linearen Scherströmung. Aufgrund der hydrodynamischen Wechselwirkung zwischen den Kugeln werden diese nicht nur in Strömungrichtung aus den Haltepositionen ausgelenkt, sondern als Funktion der mittleren Strömungsgeschwindigkeit und der Scherrate auch senkrecht dazu. Diese mit der Strömungsgeschwindigkeit zunehmende, senkrechte und stationäre Auslenkung führt in einem breiten Parameterbereich über eine Hopf-Verzweigung zu einer oszillatorischen Bewegung der Kugeln, die eine vielfältige, anharmonische Dynamik aufzeigt. Die Hopf-Verzweigung ist entweder super- oder subkritisch mit einem Hysteresebereich, dessen Breite von der Scherrate abhängt. Als eine mögliche Realisierung dieser Effekte bieten sich Polymere an, die auf Stäbchen verschiedener Länge an Wänden befestigt sind und durch die unterschiedlichen Abstände von der Wand auch unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten, ähnlich wie in einer Scherströmung, ausgesetzt sind. In einem Experiment sind mehr als drei an einer Wand befestigte Polymere zu erwarten. Daher liegt eine Erweiterung des vorliegenden Modells, bestehend aus drei Kugeln, auf eine größere Zahl festgehaltener Polymere nahe. Der Ersatz eines Polymers durch eine einzelne Kugel ist ebenfalls eine starke

Näherung, weshalb es sich für zukünftige Untersuchungen ebenso anbietet, die festgehaltenen Kugeln durch festgehaltene und über das Lösungsmittel wechselwirkende Kugel-Feder Modelle für Polymere zu ersetzen, die wiederum aus mehreren Kugeln bestehen. Die interessante Frage, die sich für beide Erweiterungen stellt, ist, ob diese zu einer komplexeren und damit chaotischen Dynamik führen. Wie bereits einleitend erwähnt, spielt auch die hier noch nicht berücksichtigte Brownsche Bewegung der verschiedenen Polymerbestandteile eine wichtige Rolle. Im Zusammenspiel mit dem Scherfluss kann diese entscheidend zu einer interessanten Dynamik beitragen.

Im Hauptteil der Arbeit wurden die thermisch angeregten Geschwindigkeitsfluktuationen in einer Scherströmung des Lösungsmittels näherungsweise berechnet und deren Einfluss auf suspendierte Kugeln, die in Polymer-Modellen üblicherweise Segmente eines Polymers repräsentieren, abgeschätzt. Ausgangspunkt zur Beschreibung der Geschwindigkeitsfluktuationen sind die um den Scherfluss linearisierten Navier-Stokes Gleichungen, mit einem stochastischen Anteil im Spannungstensor als Quelle der Fluktuationen. In großer Entfernung von Wänden konnten analytische Ausdrücke für die Geschwindigkeitsfluktuationen und deren Korrelationsfunktion abgeleitet werden. Im weiteren Verlauf der Arbeit wurde auch der Einfluss der Wände auf die Geschwindigkeitsfluktuationen in einem Couette-System durch die Entwicklung der Felder nach einem Funktionensystem untersucht.

Im mehr analytisch ausgerichteten Kapitel 4 wurde die Korrelationsmatrix der Geschwindigkeitsfluktuationen im Wellenzahlraum als Funktion der Zeit und der Frequenz angegeben und analysiert. Für bestimmte statische Korrelationsbeiträge wurde außerdem die Ortsabhängigkeit berechnet. Für kleine Scherraten wurden die Korrelationen hiernach in einer Taylorreihe bis zur zweiten Ordnung entwickelt. Die Terme linearer Ordnung in der Scherrate zeigen im Raum der Wellenzahlen ${\bf k}$ ein unsymmetrisches Verhalten bezüglich Zeitspiegelungen, wodurch unter anderem $\langle v_x(t)v_y(0)\rangle \neq \langle v_y(t)v_x(0)\rangle$ folgt. Die Abhängigkeit der statischen Korrelationen vom Betrag des Wellenzahlvektors ist proportional zu $|{\bf k}|^{-2}$ und wächst linear mit der Reynoldszahl des Systems. In quadratischer Ordnung der Scherrate ist das Zeitverhalten symmetrisch und alle statischen Elemente der Korrelationsmatrix sind proportional zu $|\mathbf{k}|^{-4}$ und quadratisch in der Reynoldszahl, wie es an anderer Stelle für ein einzelnes Element der Korrelationsmatrix bereits beschrieben wurde [40]. Während diese Proportionalitäten für alle Matrixelemente gleich sind, gilt dies nicht für die komplexe Abhängigkeit von der Orientierung der Wellenzahl. Diese führt schließlich nach einer Rücktransformation in den Ortsraum dazu, dass die im Fokus stehende statische Korrelation der beiden Geschwindigkeitskomponenten $v_x(\mathbf{r}, t=0)$ und $v_y(0,0)$ eine komplizierte Funktion der Orientierung des Verbindungsvektors \mathbf{r} ist. Die Korrelation hängt von dessen Betrag in führender Ordnung wie $|\mathbf{r}|^{-1}$ ab.

Aus den Geschwindigkeitsfluktuationen wurde anschließend die Korrelation der auf eine suspendierte Kugel wirkenden stochastischen Kräfte abgeschätzt. Insbesondere lieferte die oben bereits mehrfach genannte Kreuzkorrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen eine endliche Korrelation dieser stochastischen Kräfte in x- und y-Richtung, die zu einer um den Winkel $-\pi/2$ geneigten elliptischen Verteilung der Kräfte führt. Auch eine Erhöhung der thermischen Energie durch den Scherfluss wurde gefunden [39–41]. Die analytische Betrachtung wird durch die Ableitung der von der Scherrate abhängenden Responsefunktion abgerundet.

Die Berechung der Geschwindigkeitsfluktuationen in einer ebenen Couette-Strömung zwischen zwei bewegten Wänden wurde zunächst für ein allgemeines System von Entwicklungsfunktionen formuliert. Die numerische Berechnung der transversalen Geschwindigkeitskorrelationen wurde dann für einen speziellen Funktionensatz, der die Randbedingungen an den Wänden näherungsweise erfüllt, durchgeführt. Durch die endliche Gefäßgröße entstehen bereits für ein ruhendes System Korrekturen im Vergleich zum Fall der unendlich ausgedehnten Flüssigkeit. Die Korrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen als Funktion der Wanddistanz führt zu dem Ergebnis, dass die Fluktuationen parallel zu den Wänden größer ausfallen als diejenigen senkrecht dazu. Der Effekt ist umso stärker ausgeprägt, je dichter die Begrenzungen des Gefäßes zusammen liegen. Für große Wandabstände wird hingegen die für ein unendlich ausgedehntes System bestimmte Lösung erreicht.

Die Beiträge linear in der Scherrate wurden für die im Fokus stehende Kreuzkorrelation $\langle v_x(x,y,z)v_y(0,y_0,0)\rangle$ der Geschwindigkeitsfluktuationen berechnet. Im Kanalzentrum konnten für den Grenzfall großer Wandabstände die Ergebnisse der analytischen Näherungsrechnung, sowohl bezüglich der Abhängigkeit vom reziproken Abstandsbetrag, als auch bezüglich der Orientierung von ${\bf r}$ bestätigt werden. Für ${\bf r},$ deren Betrag größer als die halben Wanddistanz ist, fiel die Korrelation schneller als $|\mathbf{r}|^{-1}$ ab. Das Abstandsverhalten hängt dort außerdem von der Orientierung des Vektors \mathbf{r} und von den Absolutpositionen y und y_0 der beiden Geschwindigkeitskomponenten in der Richtung senkrecht zu den Wänden ab. Durch die Anwesenheit der Wände werden auch die Korrelationen der stochastischen Kräfte auf ein suspendiertes Teilchen beeinflusst. Während im Grenzfall großer Wandabstände unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Geometrien, einmal Kugel, einmal Zylinder, wieder das analytische Ergebnis gefunden werden konnte, ergab sich für Wanddistanzen d größer als die doppelte Teilchenabmessung eine funktionale Abhängigkeit wie d^{-1} . Die betragsmäßig maximale Korrelation ergab sich hierbei nicht etwa im Zentrum des Kanals, sondern näher an den Wänden. Die Entwicklungskoeffizienten der zuvor ausgegrenzten longitudinalen Geschwindigkeits- und Dichtebeiträge wurden anschließend formal im Frequenz-, Wellenzahl und Zeitraum bis zur quadratischen Ordnung in der Scherrate angegeben.

Die gefundenen Ausdrücke können in genäherter Form in Simulationen für Teilchensuspensionen oder Polymere in Scherströmungen verwendet werden und können auch zu einer realistischeren Implementierung der Fluktuationen beitragen. Um die diskutierten Effekte explizit zu messen, sind Experimente mit Brownschen Teilchen, die in Laserfallen gefangen werden, vielversprechend. Hierbei kann entweder die Fluktuationsauslenkung eines einzelnen Teilchens oder die gekoppelte Brownsche Bewegung mehrerer gefangener Partikel beobachtet werden. Neben dem für den Scherfluss zusätzlich auftretenden Einfluss durch die endliche Kanalbreite sind die in dieser Umgebung bereits für eine ruhende Flüssigkeit gefundenen anisotropischen Effekte von großem Interesse für Teilchen-Simulation und Experiment.

Anhang
A Herleitung der Fluktuationsgleichungen

Die linearisierten Bewegungsgleichungen (2.28) für die Geschwindigkeitsfluktuationen mit stochastischem Rauschen werden in diesem Anhang auf Parallelströmungen $\mathbf{u}_0 = u_0(y)\hat{\mathbf{e}}_x$ mit unterschiedlichen Strömungsprofilen $u_0(y)$ eingeschränkt,

$$(\partial_t + u_0(y)\partial_x)\rho + \partial_k v_k = 0, \qquad (A.1)$$

$$\partial_t v_i + u_0(y) \partial_x v_i + v_y \partial_y u_0(y) \delta_{ix}$$

$$= -c^2 \partial_i \rho + \nu \partial_k^2 v_i + \nu(\alpha - 1) \partial_i (\partial_k v_k) + F_i^S$$
(A.2)

und in Gleichungen für die longitudinale Geschwindigkeit \mathbf{v}^l und die transversale Geschwindigkeit \mathbf{v}^t , mit $\mathbf{v} = \mathbf{v}^l + \mathbf{v}^t$, umgeschrieben. Für diese gelten die beiden Gleichungen $\nabla \times \mathbf{v}^l = 0$ und $\nabla \cdot \mathbf{v}^t = 0$. Wendet man auf die obige Gleichung (A.2) die Rotation an, so folgt für die Vortizität $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times \mathbf{v}^t$ die Gleichung

$$\left(\partial_t - \nu \triangle + u_0(y)\partial_x\right)\boldsymbol{\omega} + u_0'(y) \begin{pmatrix} \partial_x v_z \\ \partial_z v_y \\ -\partial_x v_x - \partial_y v_y \end{pmatrix} - u_0''(y)v_y \hat{\mathbf{e}}_z = \nabla \times \mathbf{F}^S, \quad (A.3)$$

wobei $u'_0(y) = \frac{du_0(y)}{dy}$ und $u''_0(y) = \frac{d^2u_0(y)}{dy^2}$ die erste und zweite Ableitung der Strömung bezüglich y ist. Nochmalige Anwendung der Rotation ergibt wegen $\nabla \times \boldsymbol{\omega} = -\Delta \mathbf{v}^t$ schließlich

$$\begin{pmatrix} \partial_t - \nu \triangle + u_0(y) \partial_x \end{pmatrix} \triangle \mathbf{v}^t + u_0'(y) \begin{pmatrix} \triangle v_y - 2\partial_x \omega_z \\ -\partial_x (\nabla \cdot \mathbf{v}^l) \\ 2\partial_x \omega_x \end{pmatrix} + u_0''(y) \begin{pmatrix} \partial_x v_x + 2\partial_y v_y \\ -\partial_x v_y \\ \partial_x v_z \end{pmatrix} + u_0'''(y) v_y \hat{\mathbf{e}}_x = -\mathbf{G},$$
 (A.4)

mit $\mathbf{G} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{F}^S$.

Wird die Divergenz auf die Ausgangsgleichung (A.2) angewendet, so führt dies zusammen mit Gleichung (A.2) auf ein Gleichungssystem für die longitudinale Geschwindigkeitskomponente und die Dichte,

$$(\partial_t - \nu \alpha \triangle + u_0(y) \partial_x) \nabla \cdot \mathbf{v}^l + c^2 \triangle \rho + 2u'_0(y) \partial_x v_y = H, \qquad (A.5)$$

mit $H = \nabla \cdot \mathbf{F}^S$.

Wegen $\nabla \times \mathbf{v}^l = 0$ gilt auch die Beziehung $\nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) = \Delta \mathbf{v}^l$. Dies erlaubt in Gleichung (A.4) die Ersetzung $\partial_x(\nabla \cdot \mathbf{v}^l) = \Delta v_x^l$ und die Anwendung des Gradienten auf die Gleichungen (A.1) und (A.5) liefert damit die gekoppelten Gleichungen

$$(\partial_t + u_0(y)\partial_x)\nabla\rho + \triangle \mathbf{v}^l = 0,$$

$$(\partial_t - \nu\alpha\Delta + u_0(y)\partial_x)\Delta \mathbf{v}^l + c^2 \Delta \nabla\rho + 2u'_0(y)\nabla\partial_x v_y$$

$$+ \left[u'_0(y)\partial_x(\nabla \cdot \mathbf{v}^l) + 2u''_0(y)\partial_x v_y\right]\hat{\mathbf{e}}_y = \nabla H.$$
(A.6)

In der folgenden Aufstellung sind die expliziten Darstellungen der Ableitungen von $u_0(y)$ für verschiedene Strömungsprofile, sowohl in der dimensionsbehafteten, als auch in der entdimensionalisierten Form, aufgelistet:

Scherfluss: Strömungsprofil: $\check{u}_0(\check{y}) = \check{\gamma}\check{y}$. Entdimensionalisiert: $u_0(y) = gy$ mit $g := \tau \check{\gamma}$. Ableitungen: $u'_0(y) = g, u''_0(y) = u'''_0(y) = 0$.

Poiseuillefluss: Strömungsprofil: $\check{u}_0(\check{y}) = \check{\chi}\check{y}^2$. Entdimensionalisiert: $u_0(y) = Cy$ mit $C := \tau L\check{\chi}$. Ableitungen: $u'_0(y) = 2Cy$, $u''_0(y) = 2C$ und $u'''_0(y) = 0$.

Kolmogorov-Fluss: Strömungsprofil: $\check{u}_0(\check{y}) = \check{U}\sin\left(\frac{2\pi}{\check{d}}\check{y}\right)$.

Entdimensionalisiert: $u_0(y) = U \sin\left(\frac{2\pi}{d}\check{y}\right)$, mit $U = \frac{\tau}{L}\check{U}$ und $d = \frac{\check{d}}{L}$. Ableitungen: $u'_0(y) = \frac{2\pi}{d} \cos\left(\frac{2\pi}{d}\check{y}\right)$, $u''_0(y) = -\left(\frac{2\pi}{d}\right)^2 u_0(y)$ und $u'''_0(y) = -\left(\frac{2\pi}{d}\right)^2 u'_0(y)$.

B Lineare irreversible Thermodynamik

Hier sollen in Kurzform die im Kontext der Fluktuationen benötigten Zusammenhänge der linearen irreversiblen Thermodynamik [60] zusammengestellt werden.

B.1 Einstein Fluktuationstheorie

Seien A_i (i = 1...n) beliebige messbare Größen, die im thermischen Gleichgewicht die Mittelwerte $\langle A_i \rangle$ annehmen. Im Gleichgewicht ist die Entropie S_0 maximal. Für kleine Abweichungen (Fluktuationen) $\alpha_i = A_i - \langle A_i \rangle$ vom Mittelwert kann man die Entropie in einer Taylor-Reihe bezüglich α_i entwickeln, wobei die erste Ableitung der Entropie am Maximum verschwindet:

$$\Delta S = S - S_0 = \frac{1}{2} \alpha_i \alpha_j \left(\frac{\partial^2 S}{\partial A_i \partial A_j} \right)_{A_i = \langle A_i \rangle, A_j = \langle A_j \rangle}.$$
 (B.1)

Es gilt hierin die Einsteinsche Summenkonvention. Da die Gesamtentropie durch eine Fluktuation erniedrigt wird, ist die Matrix

$$g_{ij} := -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial A_i \partial A_j}\right)_{A_i = \langle A_i \rangle, A_j = \langle A_j \rangle}$$
(B.2)

positiv definit und auch symmetrisch aufgrund der Vertauschbarkeit der Ableitungen. Es gilt somit $\underline{g} = \underline{g}^T$. Führt man die zu den Fluktuationen konjugierten thermodynamischen Zustandsparameter

$$X_i := -g_{ij}\alpha_j \tag{B.3}$$

ein, so kann die Abweichung der Entropie (B.1) vom Gleichgewicht auch in folgender Form geschrieben werden:

$$\Delta S = -\frac{1}{2}\alpha_i g_{ij}\alpha_j = \frac{1}{2}\alpha_i X_i \,. \tag{B.4}$$

Die thermodynamischen Zustandsparameter X_i lassen sich damit wie folgt aus der Entropiedifferenz ermitteln:

$$X_i = \frac{\partial \Delta S}{\partial \alpha_i} \,. \tag{B.5}$$

Aus (B.3) folgt außerdem

$$\alpha_k = -g_{kj}^{-1} X_j \,. \tag{B.6}$$

Die Fluktuationen aus dem Gleichgewicht, α_i , klingen mit der Zeit wieder ab. Die zeitliche Entwicklung der α_i hängt im Allgemeinen von den Fluktuationen aller beteiligten Observablen ab und kann durch eine lineare Bewegungsgleichung der Form

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = -M_{ik}\alpha_k\,,\tag{B.7}$$

mit der konstanten Matrix M_{ij} , beschrieben werden. Die zeitlichen Ableitungen der α_i sind die so genannten thermodynamischen Flüsse

$$J_i := \frac{d\alpha_i}{dt}.$$
 (B.8)

Unter Verwendung der Beziehung (B.6) kann man diese Ströme auch durch die X_j ausdrücken,

$$J_i = L_{ij} X_j \,. \tag{B.9}$$

Die auf der rechten Seite der Gleichung eingeführten linearen Transport-Koeffizienten

$$L_{ij} := M_{ik} g_{kj}^{-1} \tag{B.10}$$

erfüllen nach Onsager [60, 68] spezielle Symmetrien. Für skalare α_i , α_j , die sich gleichartig bei Zeitumkehr verhalten, sind sie unter anderem symmetrisch $L_{ij} = L_{ji}$.

Die zeitliche Änderung der Entropie (B.4), die sogenannte *Entropieproduktion*, erhält man dann aus

$$\sigma_s := \frac{d\Delta S}{dt} = -\frac{1}{2} \frac{d\alpha_i}{dt} g_{ij} \alpha_k - \frac{1}{2} \alpha_i g_{ij} \frac{d\alpha_j}{dt} \,.$$

Da hier über beide Indizes i und j summiert wird und die Matrix \underline{g} aus (B.2) symmetrisch ist, ergibt sich für die Entropieproduktion mit (B.8) und (B.3) insgesamt der Ausdruck [60]

$$\sigma_s = J_i X_i \,. \tag{B.11}$$

B.2 Statische Korrelation und Suszeptibilität

Nach dem Boltzmann-Entropie-Postulat [58] gilt für die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\boldsymbol{\alpha})$ der in einem Vektor $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ zusammengefassten Fluktuationen in Abhängigkeit von der Entropie

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = C \exp\left(\frac{\Delta S(\boldsymbol{\alpha})}{k_B}\right).$$
 (B.12)

Hierbei ist C eine Normierungskonstante, die aus der Bedingung

$$\int d\alpha_i f(\boldsymbol{\alpha}) = 1 \tag{B.13}$$

berechnet werden kann und k_B ist die Boltzmann-Konstante. Setzt man den Ausdruck für die Entropie (B.4) in die Verteilungsfunktion (B.12) ein, so ergibt sich unter Verwendung der Beziehung (B.13) die Verteilungsfunktion

$$f(\boldsymbol{\alpha}) = \sqrt{\frac{\det \underline{g}}{(2\pi k_B)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2k_B}\alpha_i g_{ij}\alpha_j\right).$$
(B.14)

Differenziert man diesen Ausdruck nach α_k , so erhält man unter Ausnutzung der Symmetrie von g die Darstellung

$$k_B \frac{\partial \ln f}{\partial \alpha_k} = -g_{kj} \alpha_j = X_k \tag{B.15}$$

für die thermodynamischen Zustandsparameter, mit deren Hilfe sich die aus dem dyadischen Produkt von α und X zusammengesetzte statische Korrelationsmatrix

$$\langle \boldsymbol{\alpha} \mathbf{X} \rangle = \int d\boldsymbol{\alpha} \, \boldsymbol{\alpha} \mathbf{X} f(\boldsymbol{\alpha}) = k_B \int d\boldsymbol{\alpha} \, \boldsymbol{\alpha} \partial_{\boldsymbol{\alpha}} f(\boldsymbol{\alpha})$$
$$= -k_B \int d\boldsymbol{\alpha} \, f(\boldsymbol{\alpha}) \partial_{\boldsymbol{\alpha}} \boldsymbol{\alpha} = -k_B \underline{I} , \qquad (B.16)$$

berechnen lässt. Hierbei ist <u>I</u> die Einheitsmatrix. Aus dieser Korrelation lassen sich jetzt mit Hilfe der Beziehungen (B.5) und (B.3) die beiden Autokorrelationsfunktionen der Fluktuationen α ,

$$\langle \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\alpha} \rangle = k_B \underline{g}^{-1} \tag{B.17}$$

und diejenigen der Zustandsparameter X_i ,

$$\langle \mathbf{X}\mathbf{X} \rangle = k_B g \tag{B.18}$$

bestimmen.

B.2.1 Statische Suszeptibilität

Führt man alternativ zu den oben genannten thermodynamischen Zustandsparametern \mathbf{X} die mit der Temperatur T gewichteten Kräfte \mathbf{F} ,

$$\mathbf{F} := -T\mathbf{X},\tag{B.19}$$

ein und außerdem die statische Suszeptibilität χ ,

$$\underline{\chi} := \frac{1}{T} \underline{g}^{-1} \,, \tag{B.20}$$

so folgt aus (B.6) der lineare Zusammenhang

$$\alpha_k = \chi_{kj} F_j \,. \tag{B.21}$$

Damit lassen sich die Komponenten von $\underline{\chi}$ über die Beziehung

$$\chi_{kj} = \frac{\partial \alpha_k}{\partial F_j} \tag{B.22}$$

darstellen. Durch die statische Suszeptibilitä
t $\underline{\chi}$ lässt sich auch die von den Fluktuationen erzeugte Entropie
änderung

$$\Delta S = -\frac{1}{2T} \alpha_i \chi_{ij}^{-1} \alpha_j = -\frac{1}{2T} \alpha_i F_i \tag{B.23}$$

ausdrücken und ebenso die Korrelationen in (B.17) und in (B.18):

$$\langle \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\alpha} \rangle = k_B T \underline{\chi} ,$$
 (B.24a)
 $\langle \mathbf{F} \mathbf{F} \rangle = k_B T \chi^{-1} .$ (B.24b)

B.2.2 Beispiel: Geschwindigkeitsfluktuationen

Betrachtet man jetzt ein System vom Volumen V, welches aus einem Material mit der Dichte ρ besteht und somit die Gesamtmasse $M = \rho V$ besitzt. Das System habe in den drei Raumrichtungen i = 1, 2, 3 die Geschwindigkeitsfluktuationen v_i und die Impulsfluktuationen $p_i = Mv_i$. Die minimale Arbeit ΔW , die zur Erzeugung der Fluktuationen aufzubringen ist [54], ist durch die kinetischen Energie

$$\Delta W = \frac{M}{2}v_i^2 = \frac{1}{2}p_i v_i \tag{B.25}$$

gegeben. Die Änderung der Entropie ist dann gleich [54]

$$\Delta S = -\frac{\Delta W}{T} = -\frac{1}{2T}p_i v_i \,. \tag{B.26}$$

Vergleicht man den Ausdruck (B.26) mit der Beziehung (B.23) und wählt man $\alpha_i = p_i$ sowie $F_i = v_i$, so kann man mit Hilfe von Gleichung (B.22) die statischen Suszeptibilitäten in folgender Form

$$\check{\chi}_{p_i p_j} = \frac{\partial p_i}{\partial v_j} = \rho V \delta_{ij} \,, \tag{B.27}$$

$$\check{\chi}_{v_i v_j} = \check{\chi}_{p_i p_j}^{-1} = \frac{1}{\rho V} \delta_{ij} \tag{B.28}$$

ausdrücken und die Korrelationen sind mit den Gleichungen $(\mathrm{B.24})$ unmittelbar gegeben durch

$$\langle p_i p_j \rangle = k_B T \check{\chi}_{p_i p_j} = k_B T \rho V \delta_{ij} \,. \tag{B.29}$$

$$\langle v_i v_j \rangle = k_B T \check{\chi}_{v_i v_j} = \frac{k_B T}{\rho V} \delta_{ij} \,.$$
 (B.30)

(B.31)

B.3 Stochastische Kräfte (allgemein)

Ergänzt man die Gleichung (B.7) um einen stochastischen Beitrag **y** mit verschwindendem statistischem Mittelwert $\langle \mathbf{y} \rangle = 0$, welcher außerdem nicht mit $\boldsymbol{\alpha}$ korreliert, so ergeben sich die Gleichungen

$$\frac{d\alpha_i}{dt} = -M_{ik}\alpha_k + y_i \,. \tag{B.32}$$

Nach einer zeitlichen Fouriertransformation (C.2) lassen sich diese wie folgt nach den stochastischen Kräften auflösen:

$$y_{i}(\omega) = (-i\omega\delta_{il} + M_{il})^{-1}\alpha_{l}(\omega) = \left[(-i\omega\delta_{il} + M_{il})\underbrace{g_{lk}^{-1}g_{kn}}_{\delta_{ln}} \right]^{-1}\alpha_{n}(\omega)$$
$$= \left[(-i\omega g_{ik}^{-1} + L_{ik})g_{kn} \right]^{-1}\alpha_{n}(\omega) =: \Psi_{in}^{-1}\alpha_{n}(\omega) .$$
(B.33)

Die so definierte Matrix

$$\Psi_{in} := \left[(-i\omega g_{ik}^{-1} + L_{ik})g_{kn} \right]$$
(B.34)

ist symmetrisch, da die L_{ik} wegen der Onsager-Relationen und die g_{ik} aufgrund der Gleichung (B.2) symmetrisch sind. Man kann annehmen, dass die Selbstkorrelationen der stochastischen Kräfte y_i , ebenso wie diejenigen der Fluktuationen α_i invariant bezüglich Translationen in der Zeit sind, also $\langle y_i(t + \Delta t)y_j(t' + \Delta t)\rangle = \langle y_i(t)y_j(t')\rangle$ für beliebige Δt gilt, so dass für die frequenzabhängigen Korrelationen der stochastischen Kräfte die Beziehung

$$\begin{split} \langle y_i(\omega)y_j(\omega')\rangle &= \int dt \int dt' \langle y_i(t)y_j(t')\rangle e^{i\omega t + i\omega't'} = \int dt \int dt' \langle y_i(t-t')y_j(0)\rangle e^{i\omega t + i\omega't'} \\ &= \int d(t-t') \langle y_i(t-t')y_j(0)\rangle e^{i\omega(t-t')} \int dt' e^{i(\omega+\omega')t'} \\ &= 2\pi\delta(\omega+\omega') \int d(t-t') \langle y_i(t-t')y_j(0)\rangle e^{i\omega(t-t')} \\ &= 2\pi\delta(\omega+\omega') \langle y_iy_j\rangle(\omega) \,, \end{split}$$

mit $\bar{t} = t - t'$ und der Definition

$$\langle y_i y_j \rangle(\omega) := \int d\bar{t} \ \langle y_i(\bar{t}) y_j(0) \rangle e^{i\omega\bar{t}} .$$
 (B.35)

gilt. Analog findet man für die frequenzabhängigen Korrelationen der Fluktuationen den Ausdruck

$$\langle \alpha_n(\omega)\alpha_m(\omega')\rangle = 2\pi\delta(\omega+\omega')\langle \alpha_n\alpha_m\rangle(\omega)$$

mit

$$\langle \alpha_n \alpha_m \rangle(\omega) := \int d\bar{t} \, \langle \alpha_n(\bar{t}) \alpha_m(0) \rangle e^{i\omega\bar{t}} \,.$$
 (B.36)

Unter Verwendung von (B.33) ergibt sich dann der Zusammenhang

$$\langle y_i y_j \rangle(\omega) = \Psi_{in}^{-1}(\omega) \langle \alpha_n \alpha_m \rangle(\omega) \Psi_{mj}^{-1}(-\omega)$$
(B.37)

zwischen den beiden spektralen Korrelationen.

Die spektralen Korrelationen der stochastischen Kräfte erhält man also aus (B.37), falls man die Korrelationen der Fluktuationen kennt. Letztere kann man sich ableiten, indem man die Fluktuation zum Zeitpunkt t = 0, $\alpha_m(t = 0)$, von rechts an die Gleichung (B.32) multipliziert und über die stochastischen Kräfte mittelt:

$$\frac{d}{dt} \langle \alpha_i(t) \alpha_m(t=0) \rangle = -M_{in} \langle \alpha_n(t) \alpha_m(t=0) \rangle.$$
(B.38)

Da diese Gleichung nur für $t \ge 0$ gültig ist (gekennzeichnet durch ein hochgestelltes "+"-Zeichen), führt man eine Laplace-Transformation bezüglich der Zeit durch. Mit Hilfe der in Abschnitt C.2 angegebenen Transformation erhält man

$$-is\delta_{in}\langle\alpha_n\alpha_m\rangle^{(+)}(s) + M_{in}\langle\alpha_n\alpha_m\rangle^+(s) = \langle\alpha_i(t=0)\alpha_m(t=0)\rangle.$$
(B.39)

Auf der rechten Seite der Gleichung (B.39) findet sich jetzt die statische Korrelation, die im vorangegangenen Abschnitt B.1 aus der Einsteinschen Fluktuationstheorie abgeleitet wurde. Mit (B.17) ergibt sich nach weiteren Umformungen der Zusammenhang

$$\langle \alpha_n \alpha_m \rangle^+(s) = k_B (-is\delta_{ni} + M_{ni})^{-1} g_{im}^{-1} = k_B [(-is\delta_{nl} + M_{nl})g_{lk}^{-1}g_{ki}]^{-1} g_{im}^{-1} = k_B [(-isg_{nk}^{-1} + L_{nk})g_{ki}]^{-1} g_{im}^{-1} = k_B \Psi_{ni}^{-1}(s) g_{im}^{-1}.$$
(B.40)

Die Fouriertransformierte der Korrelation erhält man unter Ausnutzung der Zeittranslationsinvarianz aus

$$\langle \alpha_n \alpha_m \rangle(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \ \langle \alpha_n(t) \alpha_m(0) \rangle e^{-i\omega t}$$

$$= \int_0^{\infty} dt \ \langle \alpha_n(t) \alpha_m(0) \rangle e^{-i\omega t} + \int_0^{\infty} dt \ \langle \alpha_n(-t) \alpha_m(0) \rangle e^{i\omega t}$$

$$= \int_0^{\infty} dt \ \langle \alpha_n(t) \alpha_m(0) \rangle e^{-i\omega t} + \int_0^{\infty} dt \ \langle \alpha_m(t) \alpha_n(0) \rangle e^{i\omega t}$$

$$= \langle \alpha_n \alpha_m \rangle^+ (s = \omega) + \langle \alpha_m \alpha_n \rangle^+ (s = -\omega) .$$
(B.41)

Nach Einsetzen von (B.40) ergibt sich mit der Symmetrie von Ψ_{ij} und g_{ij} schließlich die spektrale Dichte der Fluktuationen von α :

$$\langle \alpha_n \alpha_m \rangle(\omega) = k_B \Psi_{nl}(\omega) g_{lm}^{-1} + k_B g_{nk}^{-1} \Psi_{km}(-\omega) \,. \tag{B.42}$$

Die spektrale Dichte zweier Größen ist somit ohne Kenntnis der stochastischen Kraft nur aus der linearen Bewegungsgleichung und der aus der Thermodynamik zu bestimmenden, statischen Korrelation ableitbar. Die stochastischen Kräfte werden durch die Gleichung (B.37) so festgelegt, dass sie die richtige statische Korrelation (B.17) erzeugen. Weitere Umformungen der Gleichung (B.37) liefern

$$\langle y_i(\omega)y_j(-\omega)\rangle = k_B \Psi_{in}^{-1}(\omega) \Big[\Psi_{nl}(\omega)g_{lm}^{-1} + g_{nk}^{-1}\Psi_{km}(-\omega) \Big] \Psi_{mj}^{-1}(-\omega) = k_B \Big(g_{im}^{-1}\Psi_{mj}^{-1}(-\omega) + \Psi_{in}^{-1}(\omega)g_{nj}^{-1} \Big) = k_B \Big[-i\omega g_{ij}^{-1} + L_{ij} + i\omega g_{ij}^{-1} + L_{ij} \Big] = 2k_B L_{ij} ,$$

wobei in der zweiten Zeile die Darstellung von Ψ aus Gleichung (B.34) verwendet wurde. Mit Hilfe von Gleichung (B.35) lautet damit die Korrelationsfunktion der stochastischen Kräfte im Frequenzraum

$$\langle y_i(\omega)y_j(\omega')\rangle = 2k_B L_{ij}(2\pi)\delta(\omega+\omega').$$
 (B.43)

Ist die Entropieproduktion in der Form (B.11) bekannt, so lassen sich neben der Darstellung durch (B.37) mit (B.42) auch auf diesem Wege die stochastischen Kräfte bestimmen.

B.4 Hydrodynamische Fluktuationen

Die Beziehung (B.43) kann man zur Berechnung des stochastischen Spannungstensors heranziehen, der in den vorderen Kapiteln Anwendung findet [56]. Das lineare Materialgesetz für viskose Flüssigkeiten,

$$\sigma_{ij} = \eta_{ijkl} \partial_k v_l \,, \tag{B.44}$$

liefert eine Beziehung zwischen dem Spannungstensor und den Gradienten der Geschwindigkeitskomponenten. Für isotrope Newtonsche Flüssigkeiten lässt sich der vierstufige Viskositätstensor η_{ijkl} durch Produkte des Kronecker- δ in folgender Form ausdrücken

$$\eta_{ijkl} = \eta(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + \left(\zeta - \frac{2}{3}\eta\right)\delta_{ij}\delta_{kl}, \qquad (B.45)$$

so dass für den Spannungstensor die unter (2.14) angegebene Beziehung gilt:

$$\sigma_{ij} = \eta \left(\partial_i v_j + \partial_j v_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \partial_k v_k \right) + \zeta \delta_{ij} \partial_k v_k \,. \tag{B.46}$$

Aus der Gleichung (2.13) für die zeitliche Änderung der spezifischen Entropie kann man den durch die Flüssigkeitsgradienten bedingten Anteil ΔS für die Änderung der Entropie in einem Flüssigkeitselement vom Volumen ΔV ablesen:

$$\frac{d}{dt}\Delta S = \frac{\Delta V}{T}\sigma_{ij}\partial_j v_i.$$
(B.47)

Vergleicht man diesen Zusammenhang mit der Darstellung (B.11) für die Entropieproduktion, so liegt es nahe, die Elemente des Spannungstensors als Flüsse-Matrix J_{ij} und den Anteil mit den Geschwindigkeitsgradienten entsprechend als thermodynamische Zustandsparameter zu betrachten:

$$J_{ij} = \sigma_{ij} ,$$

$$X_{ij} = \frac{\Delta V}{T} \partial_i v_j .$$
(B.48)

Die Gleichung für das lineare Materialgesetz (B.44) nimmt mit den neuen Bezeichnungen die Form

$$J_{ij} = \frac{T}{\Delta V} \eta_{ijkl} X_{kl} \tag{B.49}$$

an, was nach einem Vergleich mit (B.9) die linearen Transportkoeffizienten

$$L_{ijkl} = \frac{T}{\Delta V} \eta_{ijkl} \tag{B.50}$$

liefert. Die stochastischen Kräfte y_{ij} , die auf ein einzelnes Flüssigkeitselement wirken, ergeben sich mit der Beziehung (B.43) damit unmittelbar zu

$$\langle y_{ij}(\omega)y_{kl}(\omega')\rangle = 2\frac{k_BT}{\Delta V}\eta_{ijkl}(2\pi)\delta(\omega+\omega').$$
 (B.51)

Eine Rücktransformation in die Zeit liefert dann

$$\langle y_{ij}(t)y_{kl}(t')\rangle = 2\frac{k_B T}{\Delta V}\eta_{ijkl}\delta(t-t').$$
(B.52)

Nimmt man im Folgenden an, dass die Fluktuationen der verschiedenen Flüssigkeitselemente, die sich an verschiedenen Orten **r** befinden, unabhängig voneinander sind, dann kann man für infinitesimale Volumen ΔV schließlich die Korrelation des stochastischen Spannungstensors ξ_{ij} zwischen den beiden Punkten \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 wie folgt darstellen

$$\langle \xi_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) \xi_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle = 2k_B T \eta_{ijkl} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t - t') \tag{B.53}$$

und es gilt offensichtlich der Zusammenhang

$$\langle y_{ij}(t)y_{kl}(t')\rangle = \frac{1}{\Delta V^2} \int_{\Delta V} d\mathbf{r}_1 \int_{\Delta V} d\mathbf{r}_2 \left\langle \xi_{ik}(t_1,\mathbf{r}_1)\xi_{lm}(t_2,\mathbf{r}_2)\right\rangle.$$
(B.54)

Für eine Newtonsche Flüssigkeit erhält man mit (B.45) dann die bekannte Darstellung

$$\langle \xi_{ik}(t_1, \mathbf{r}_1) \xi_{lm}(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle$$

$$= 2k_B T \Big[\eta(\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + \Big(\zeta - \frac{2}{3} \eta \Big) \delta_{ik} \delta_{lm} \Big] \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2) \,.$$
(B.55)

Wie in der Referenz [58] vorgeführt, kann man diese Korrelationen des stochastischen Spannungstensors auch aus der Korrelation der Geschwindigkeiten in einer Flüssigkeit ableiten, ohne die Entropieproduktion und damit die Transportkoeffizienten zu kennen. Dies würde dann im vorangegangenen Abschnitt dem Ausnutzen der Relation (B.37) entsprechen.

B.5 Zusammenhang mit räumlichen Korrelationen

Da die Hydrodynamik eine Kontinuumstheorie ist, hat man es mit Feldvariablen und weniger mit diskreten Volumina zu tun. Daher sollen im Folgenden, ähnlich wie in Gleichung (B.54), einige Beziehungen zwischen den zuvor betrachteten Zusammenhängen und den ortsabhängigen Feldvariablen aufgestellt werden. Seien $a_i = a_i(\mathbf{r})$ ortsabhängige Fluktuationen, dann ist

$$S_{a_i a_j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle a_i(\mathbf{r}) a_j(\mathbf{r}') \rangle \tag{B.56}$$

die Korrelation zwischen diesen Variablen an den Orten ${\bf r}$ und ${\bf r}'.$

Die Korrelation der über ein Volumen V integrierten Variablen a_i , gegeben durch¹ $\alpha_i = \int_V d\mathbf{r} \ a_i(\mathbf{r})$, ist nach (B.17) gleich

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = \int_V d\mathbf{r} \int_V d\mathbf{r}' \, \langle a_i(\mathbf{r}) a_j(\mathbf{r}') \rangle = k_B g_{ij}^{-1} = k_B T \chi_{ij} \,. \tag{B.57}$$

¹ Dies gilt nur, falls die α_i extensive Größen sind. Für intensive Größen muss man hingegen den über das Volumen gemittelten Wert $\alpha_i = \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{r} \ a_i(\mathbf{r})$ verwenden.

Nimmt man Translations
invarianz an, so gilt für beliebige $\Delta {\bf r}$

$$\langle a_i(\mathbf{r})a_j(\mathbf{r}')\rangle = \langle a_i(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r})a_j(\mathbf{r}' + \Delta \mathbf{r})\rangle.$$
 (B.58)

Mit der Wahl $\Delta \mathbf{r} = -\mathbf{r}'$ ergibt sich

$$\langle a_i(\mathbf{r})a_j(\mathbf{r}')\rangle = \langle a_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}')a_j(0)\rangle =: S_{a_i a_j}(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
 (B.59)

Mit dem Abstandsvektor $\mathbf{R}=\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ erhält man som
it die Darstellung

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = \int_V d\mathbf{r}' \int_V d\mathbf{R} \ S_{a_i a_j}(\mathbf{R}) = V \int_V d\mathbf{R} \ S_{a_i a_j}(\mathbf{R}) \,.$$
(B.60)

Die Fouriertransformation der Korrelation (B.56) in den Wellenzahlraum ist

$$S_{a_i a_j}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \, \langle a_i(\mathbf{r}) a_j(\mathbf{r}') \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}$$

= $\int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{R} \, \langle a_i(\mathbf{R}) a_j(0) \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'}$
= $(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \int d\mathbf{R} \, S_{a_i a_j}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$
=: $S_{a_i a_j}(\mathbf{k})(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$, (B.61)

wobei in der zweiten Zeile die Translationsinvarianz ausgenutzt wurde. Die Matrix der Strukturfaktoren $S_{a_i a_j}(\mathbf{k})$ ist somit die Fouriertransformierte von $S_{a_i a_j}(\mathbf{R})$

$$S_{a_i a_j}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{R} \ S_{a_i a_j}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \int d\mathbf{R} \ \langle a_i(\mathbf{R})a_j(0)\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} , \qquad (B.62)$$

so dass umgekehrt die Beziehung

$$S_{a_i a_j}(\mathbf{R}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} S_{a_i a_j}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$$
(B.63)

gilt. Nutzt man diese Darstellung in Gleichung (B.60) aus, kann man letztere umformen und man erhält

$$\begin{aligned} \langle \alpha_i \alpha_j \rangle &= V \int_V d\mathbf{R} \ S_{a_i a_j}(\mathbf{R}) \\ &= V \int_V d\mathbf{R} \ \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ S_{a_i a_j}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \\ &= V \int d\mathbf{k} \ S_{a_i a_j}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}) \\ &= V \lim_{\mathbf{k} \to 0} S_{a_i a_j}(\mathbf{k}) \,. \end{aligned}$$
(B.64)

Mit (B.57) gilt dann der Zusammenhang

$$V \lim_{\mathbf{k} \to 0} S_{a_i a_j}(\mathbf{k}) = k_B g_{ij}^{-1} = k_B T \chi_{ij} \,. \tag{B.65}$$

B.5.1 Beispiel: Geschwindigkeitsfluktuationen

Im Falle der Geschwindigkeitsfluktuationen sind die Fluktuationen $a_i(\mathbf{r})$ aus (B.56) gleich den extensiven Impulsen $p_i(\mathbf{r})$. Für den statischen Strukturfaktor erhält man dann mit Hilfe von (B.65)

$$V \lim_{\mathbf{k} \to 0} S_{p_i p_j}(\mathbf{k}) = k_B T \check{\chi}_{p_i p_j}.$$
(B.66)

Setzt man die statische Suszeptibilität aus Gleichung (B.27) ein, ergibt sich schließlich

$$V \lim_{\mathbf{k} \to 0} S_{p_i p_j}(\mathbf{k}) = k_B T \rho V \delta_{ij} \,. \tag{B.67}$$

Für die homogenen Geschwindigkeitsfluktuationen erhält man entsprechend

$$V \lim_{\mathbf{k} \to 0} S_{v_i v_j}(\mathbf{k}) = k_B T \check{\chi}_{v_i v_j} = \frac{k_B T}{\rho V} \delta_{ij} \,. \tag{B.68}$$

C Fourier- und Laplace-Transformation

C.1 Fourier-Transformation

In dieser Arbeit werden die folgenden Konventionen für die Fourier-Transformation verwendet. Für die räumliche Fourier-Transformation gilt

$$a(k,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ a(x,t)e^{-ikx}, \qquad a(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \ a(k,t)e^{ikx} \qquad (C.1)$$

und für die zeitliche Fourier-Transformation

$$b(x,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \ b(x,t)e^{i\omega t}, \qquad b(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}b(x,\omega)e^{-i\omega t}. \quad (C.2)$$

Darstellung der Dirac-Distribution

Die Darstellung der Dirac $\delta\text{-Distributionen}$ im Orts- und Fourierraum sind gegeben durch

$$\delta(x - x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x - x')},$$

$$2\pi\delta(k + k') = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(k + k')x}.$$
(C.3)

Analog dazu gelten für die Zeit- und Frequenzdarstellungen

$$\delta(t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-i\omega(t - t')},$$

$$2\pi\delta(\omega + \omega') = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega + \omega')t}.$$
(C.4)

Der Grenzübergang $k \rightarrow 0$

Ist man am Integral einer Funktion a(x,t) über den ganzen Raum interessiert, so lässt sich dieses bei Kenntnis der Fouriertransformierten a(k,t) nach folgender Herleitung,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ a(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \ a(k,t) \int_{-\infty}^{\infty} dx \ e^{ikx}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \ a(k,t) 2\pi \delta(k)$$
$$= \lim_{k \to 0} a(k,t) , \qquad (C.5)$$

leicht durch den Grenzübergang $\lim_{k\to 0} a(k,t)$ bestimmen.

C.1.1 Faltung in der Zeit

Das Produkt der Fouriertransformierten $a(\omega)$ und $b(\omega)$ der Funktionen a(t) und b(t) berechnet sich zu

$$\begin{split} h(\omega) &= a(\omega)b(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ dt' \ a(t)b(t')e^{i\omega(t+t')} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} \ \int_{-\infty}^{\infty} dt \ a(t)b(\bar{t}-t)e^{i\omega\bar{t}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} \ h(\bar{t})e^{i\omega\bar{t}} \,, \end{split}$$

wobei in der zweiten Zeile $t' = \bar{t} - t$ substituiert wurde. Die Rücktransformation von $h(\omega)$, gegeben durch die Funktion $h(\bar{t})$, ist somit durch das Faltungsintegral

$$h(\bar{t}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \ a(t)b(\bar{t}-t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \ a(\bar{t}-t')b(t')$$
(C.6)

gegeben. Betrachtet man stattdessen die Faltung $\underline{H}(t)$ zweier Matrizen $\underline{A}(t)$ und $\underline{B}(t)$,

$$\underline{H}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \underline{A}(\tau) \underline{B}(t-\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \underline{A}(t-\tau) \underline{B}(\tau), \qquad (C.7)$$

so ist die Fourier-Transformatierte $\underline{H}(\omega)$ gleich dem Matrixprodukt

$$\underline{H}(\omega) = \underline{A}(\omega)\underline{B}(\omega).$$
(C.8)

C.1.2 Nützliche Eigenschaften der Fourier-Darstellung

Für die zu einer Matrix $\underline{A}(\omega)$ adjungierte Matrix gilt

$$\underline{A}^{\dagger}(\omega) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt' \,\underline{A}(t')e^{i\omega t'}\right]^{\dagger} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \,\underline{A}^{\dagger}(t')e^{-i\omega t'}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt \,\underline{A}^{\dagger}(-t)e^{i\omega t}, \qquad (C.9)$$

wobei in der letzten Zeile t' = -t substituiert wurde. Ist jetzt $\underline{A}(\omega) = \underline{A}^{\dagger}(\omega)$, so folgt mit (C.9), dass $\underline{A}(t) = \underline{A}^{\dagger}(-t)$. Ist zum anderen $\underline{A}(\omega) = \underline{A}^{\dagger}(-\omega)$, so ergibt sich mit

$$\underline{A}^{\dagger}(-\omega) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} dt' \,\underline{A}(t')e^{-i\omega t'}\right]^{\dagger} = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \,\underline{A}^{\dagger}(t')e^{i\omega t'}$$
$$\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \,\underline{A}(t')e^{i\omega t'} = \underline{A}(\omega)$$
(C.10)

die Hermitizität $\underline{A}^{\dagger}(t) = \underline{A}(t).$

150

C.2 Zeitliche Laplace-Transformation

Die zeitliche Laplace-Transformation sei gegeben durch

$$b(s) = \int_0^\infty dt \ b(t)e^{ist} , \qquad (C.11)$$

die Rücktransformation ergibt sich mit Hilfe des Bromwich Integrals [69] zu

$$b(t) = \int_{-\infty+ic}^{\infty+ic} ds \ b(s)e^{-ist}$$
. (C.12)

Hier ist immer $s = \omega + i\epsilon$ mit $\epsilon > 0$ damit der Integrand konvergiert.

Zeitableitung. Insbesondere gilt für die Laplace-Transformation einer nach der Zeit abgeleiteteten Größe nach partieller Integration:

$$\int_0^\infty dt \ e^{ist} \partial_t b(t) = -b(t=0) - isb(s) \,. \tag{C.13}$$

C.2.1 Matrixpropagatoren

Die Laplace-Transformation des Propagators

$$\underline{G}(t) = e^{-\underline{A}t} \tag{C.14}$$

ist gegeben durch

$$\underline{G}(s) = \int_0^\infty dt \ e^{ist} e^{-\underline{A}t} = (-is\underline{I} + \underline{A})^{-1}.$$
(C.15)

Dies lässt sich allgemein mit der Summendarstellung des Propagators zeigen.¹ Für $s = \omega$ ergeben sich daraus die *Fourier-Transformierten* der Matrixpropagatoren $\underline{G}^{(+)}(t) := \Theta(t)e^{-\underline{A}t}$ und $\underline{G}^{(-)}(t) := \left(\underline{G}^{(+)}(-t)\right)^{\dagger} = \Theta(-t)e^{+\underline{A}^{\dagger}t}$ mit Hilfe der Eigenschaft (C.9) zu

$$\underline{G}^{(+)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \ \Theta(t) e^{-\underline{A}t} e^{i\omega t} = (-i\omega \underline{I} + \underline{A})^{-1},$$

$$\underline{G}^{(-)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \ \Theta(-t) e^{+\underline{A}^{\dagger}t} e^{i\omega t} = (i\omega \underline{I} + \underline{A}^{\dagger})^{-1}, \qquad (C.16)$$

wobei $\Theta(t)$ die Heaviside-Stufenfunktion ist, und die Eigenwerte von <u>A</u> positiv sein müssen, damit die Integrale konvergieren.

¹ Falls <u>A</u> diagonalisierbar ist, kann man mit der Diagonalmatrix <u>A</u>_D und den Transformationsmatrizen <u>D</u>, eine Hauptachsentransformation durchführen, so dass <u>G</u>(t) = <u>D</u>⁻¹e^{-A_Dt}<u>D</u> gilt. Die Laplace-Transformation kann dann über die Elemente der Diagonalmatrix exp (<u>A</u>_Dt) durchgeführt werden. Die anschließende Matrixmultiplikation mit <u>D</u> liefert die Darstellung (C.15).

C.2.2 Faltung bei Laplace-Transformation

Ausgehend vom Produkt zweier Laplace-Transformierter Matrizen gilt

$$\begin{split} \underline{H}(z) &= \underline{A}(z)\underline{B}(z) = \int_0^\infty dt \ e^{ist}\underline{A}(t) \int_0^\infty dt' \ e^{ist'}\underline{B}(t') \\ &= \int_0^\infty dt \ e^{ist}\underline{A}(t) \int_0^\infty dt_2 \ e^{-ist+is(t'+t)}\underline{B}(-t+(t'+t)) \\ &= \int_0^\infty dt \ \underline{A}(t) \int_t^\infty d\bar{t} \ e^{is\bar{t}}\underline{B}(\bar{t}-t) \\ &= \int_0^\infty d\bar{t} \ e^{is\bar{t}} \int_0^t dt \ \underline{A}(t)\underline{B}(\bar{t}-t) = \int_0^\infty d\bar{t} \ e^{iz\bar{t}}H(\bar{t}) \,. \end{split}$$

In der dritten Zeile wurde $\bar{t} = t' + t$ substituiert und in der letzten Zeile wurden die Integrationen vertauscht. Somit ist $H(\bar{t})$ durch das folgende Faltungsintegral gegeben:

$$H(\bar{t}) = \int_0^t dt' \underline{A}(t')\underline{B}(\bar{t} - t'). \qquad (C.17)$$

C.3 Lösung spezieller Faltungsintegrale und Definition der Faltungstensoren

Bei der Berechnung der Fluktuationskorrelationen treten zwei spezielle Fälle von Faltungsintegralen auf, deren Lösung sich in Tensoren zusammenfassen lässt. Dies birgt den Vorteil, dass die einzelnen Ausdrücke für die Korrelationsmatrizen übersichtlicher dargestellt werden können und zum anderen zur numerischen Berechnung die Zeitintegrationen bei der Programmierung nicht explizit durchgeführt werden müssen, sondern durch die entsprechenden analytisch gewonnenen Tensorausdrücke ersetzt werden können.

Es handelt sich um die Integrale

$$\int_{t_0}^{t_1} d\tau e^{\underline{V}(s-\tau)} \underline{\Omega} e^{W(t-\tau)} , \qquad (C.18)$$

im folgenden "Zeitintegral 1" genannt, und

$$\int_{t_0}^{t_1} d\tau \tau e^{\underline{V}(s-\tau)} \underline{\Omega} e^{\underline{W}(t-\tau)} , \qquad (C.19)$$

welches "Zeitintegral 2" genannt wird und zusätzlich zu (C.18) ein multiplikaties τ im Integranden hat.

Die Matrizen <u>V</u> und <u>W</u> sollen jeweils die Eigenwerte v_i und w_i besitzen und mit Hilfe der Transformationsmatrizen Q und <u>P</u> auf Diagonalform gebracht werden können:

$$v_{i}\delta_{ij} = Q_{ik}^{-1}V_{kl}Q_{lj}, w_{i}\delta_{ij} = P_{ik}^{-1}W_{kl}P_{lj}.$$
(C.20)

Zeitintegral 1

Die Komponente "ij" des Integrals (C.18) kann wie folgt berechnet werden,

$$Q_{in} \int_{t_0}^{t_1} d\tau \, e^{v_n (s-\tau)} \delta_{n\nu} Q_{\nu k}^{-1} \Omega_{kl} P_{l\mu} \delta_{\mu m} e^{w_m (t-\tau)} P_{mj}^{-1} = Q_{in} e^{v_n s} \int_{t_0}^{t_1} d\tau e^{-(v_n + w_m)\tau} Q_{nk}^{-1} \Omega_{kl} P_{lm} e^{w_m t} P_{mj}^{-1}, \qquad (C.21)$$

wobei zur Durchführung des Integrals in der letzten Zeile unterschieden werden muß, ob $v_n + w_m = 0$ ist oder nicht.

Fall $v_n \neq -w_m$: Ist $v_n \neq -w_m$, lässt sich das Integral (C.21) wie folgt lösen

$$Q_{in}e^{v_{n}(s-\tau)}\frac{(-Q_{nk}^{-1}P_{lm})}{(v_{n}+w_{m})}\Omega_{kl}e^{w_{m}(t-\tau)}P_{mj}^{-1}\Big|_{t_{0}}^{t_{1}}$$

$$=Q_{in}e^{v_{n}(s-\tau)}\overbrace{Q_{n\alpha}^{-1}Q_{\alpha\nu}}^{\delta_{n\nu}}\frac{(-Q_{\nu k}^{-1}P_{l\mu})}{(v_{\nu}+w_{\mu})}\Omega_{kl}\overbrace{P_{\mu\beta}^{-1}P_{\beta m}}^{\delta_{\mu m}}e^{w_{m}(t-\tau)}P_{mj}^{-1}\Big|_{t_{0}}^{t_{1}}$$

$$=(e^{\underline{V}(s-\tau)})_{i\alpha}T_{e;\alpha\beta lk}^{VW}\Omega_{kl}(e^{\underline{W}(t-\tau)})_{\beta j}\Big|_{t_{0}}^{t_{1}},$$
(C.22)

wobei der vierstufige Tensor

$$T_{e;\alpha\beta lk}^{VW} := -Q_{\alpha\nu}Q_{\nu k}^{-1}P_{l\mu}P_{\mu\beta}^{-1} \times \begin{cases} (v_{\nu} + w_{\mu})^{-1}, \text{wenn } v_{\nu} + w_{\mu} \neq 0\\ 0, \text{ sonst} \end{cases}$$
(C.23)

eingeführt wurde. Der Index "e" des Tensors steht für "exponentiell", da es die Lösung eines Integrals über eine Exponentialfunktion ist.

Fall $v_n = -w_m$: In diesem Fall ist die vordere Exponentialfunktion im Integranden von (C.21) gleich Eins, womit der Integrand unabhängig von τ wird. Somit ergibt sich einfach

$$(t_1 - t_0)(e^{\underline{V}s})_{i\alpha}T^{VW}_{t;\alpha\beta lk}\Omega_{kl}(e^{\underline{W}t})_{\beta j}$$
(C.24)

mit dem Tensor

$$T_{t;\alpha\beta lk}^{VW} := Q_{\alpha\nu} Q_{\nu k}^{-1} P_{l\mu} P_{\mu\beta}^{-1} \times \begin{cases} 1, \text{ wenn } v_{\nu} + w_{\mu} = 0\\ 0, \text{ sonst} \end{cases} , \qquad (C.25)$$

wobei das "t" für "time" steht, da die Lösung des Integrals linear in der Zeitdifferenz ist.

Durch entsprechende Substitutionen im Ausgangsintegral kann man außerdem zeigen, dass man in (C.24) alternativ auch die Exponentialfunktion nach hinten schieben kann:

$$(t_1 - t_0)(e^{\underline{V}(s-t)})_{i\alpha}T^{VW}_{t;\alpha jlk}\Omega_{kl} = (t_1 - t_0)T^{VW}_{t;i\beta lk}\Omega_{kl}(e^{\underline{V}(t-s)})_{\beta j}.$$
 (C.26)

Fasst man die beiden Fälle zusammen, erhält man als Gesamtlösung des Integrals (C.18) den Ausdruck:

$$\int_{t_0}^{t_1} d\tau e^{\underline{V}(s-\tau)} \underline{\Omega} e^{\underline{W}(t-\tau)} = e^{\underline{V}(s-t_1)} \underline{\underline{T}}_e^{VW} \underline{\Omega} e^{\underline{W}(t-t_1)} - e^{\underline{V}(s-t_0)} \underline{\underline{T}}_e^{VW} \underline{\Omega} e^{\underline{W}(t-t_0)} + (t_1 - t_0) e^{\underline{V}s} \underline{\underline{T}}_t^{VW} \underline{\Omega} e^{\underline{W}t} .$$
(C.27)

Spezialfall. Wenn $\underline{W} = \underline{V}^{\dagger}$ gilt und keine rein imaginären Eigenwerte besitzt, gilt

$$\int_{t_0}^{t_1} d\tau e^{\underline{V}(s-\tau)} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-\tau)} = e^{\underline{V}(s-t_1)} \underline{\underline{T}}_e^{VV^{\dagger}} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-t_1)} - e^{\underline{V}(s-t_0)} \underline{\underline{T}}_e^{VV^{\dagger}} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-t_0)} \quad (C.28)$$

mit $T_{e;\alpha\beta lk}^{VV^{\dagger}} := -Q_{\alpha\nu} Q_{\nu k}^{-1} Q_{l\mu}^{-\dagger} Q_{\mu\beta}^{\dagger} (v_{\nu} + v_{\mu}^*)^{-1}.$

Zeitintegral 2

Auf ähnliche Weise wie das erste Zeitintegral gelöst wurde erhält man nach einer partiellen Integration von (C.19) den Ausdruck

$$\int_{t_0}^{t_1} d\tau \tau e^{\underline{V}(s-\tau)} \underline{\Omega} \, e^{\underline{W}(t-\tau)} = t_1 e^{\underline{V}(s-t_1)} \underline{\underline{T}}_e^{VW} \underline{\Omega} \, e^{\underline{W}(t-t_1)} - t_0 e^{\underline{V}(s-t_0)} \underline{\underline{T}}_e^{VW} \underline{\Omega} \, e^{\underline{W}(t-t_0)} \\ e^{\underline{V}(s-t_1)} \underline{\underline{T}}_{e^2}^{VW} \underline{\Omega} \, e^{\underline{W}(t-t_1)} - e^{\underline{V}(s-t_0)} \underline{\underline{T}}_{e^2}^{VW} \underline{\Omega} \, e^{\underline{W}(t-t_0)} \\ + \frac{1}{2} (t_1^2 - t_0^2) e^{\underline{V}s} \underline{\underline{T}}_t^{VW} \underline{\Omega} \, e^{\underline{W}t} \,.$$
(C.29)

Hierbei wurde zusätzlich zu (C.23) und (C.25) der Tensor

$$T_{e2;\alpha\beta lk}^{VW} := -Q_{\alpha\nu}Q_{\nu k}^{-1}P_{l\mu}P_{\mu\beta}^{-1} \times \begin{cases} (v_{\nu} + w_{\mu})^{-2}, \text{ wenn } v_{\nu} + w_{\mu} \neq 0\\ 0, \text{ sonst} \end{cases}$$
(C.30)

verwendet, wobei der Index "e2" auf die zweifache Integration über eine Exponentialfunktion hindeuten soll, und damit das Inverse des Quadrates über die Eigenwerte auftritt.

Spezialfall. Falls $\underline{W} = \underline{V}$ keine rein imaginären Eigenwerte besitzt gilt

$$\int_{t_0}^{t_1} d\tau \tau e^{\underline{V}(s-\tau)} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-\tau)} = t_1 e^{\underline{V}(s-t_1)} \underline{\underline{T}}_e^{VV^{\dagger}} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-t_1)} - t_0 e^{\underline{V}(s-t_0)} \underline{\underline{T}}_e^{VV^{\dagger}} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-t_0)}$$
$$e^{\underline{V}(s-t_1)} \underline{\underline{T}}_{e2}^{VV^{\dagger}} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-t_1)} - e^{\underline{V}(s-t_0)} \underline{\underline{T}}_{e2}^{VV^{\dagger}} \underline{\Omega} e^{\underline{V}^{\dagger}(t-t_0)} \quad (C.31)$$
mit $T_{e2;\alpha\beta lk}^{VV^{\dagger}} := -Q_{\alpha\nu} Q_{\nu k}^{-1} Q_{l\mu}^{-\dagger} Q_{\mu\beta}^{\dagger} (v_{\nu} + v_{\mu}^{*})^{-2}.$

C.3.1 Eigenschaften der Faltungstensoren

Mit Hilfe der Indexdarstellung für die Tensoren findet man die folgenden Transformationseigenschaften für die in (C.23), (C.25) und (C.30) eingeführten Faltungstensoren

$$(\underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\underline{M})^{\dagger} = \underline{\underline{T}}_{e}^{AA^{\dagger}}\underline{M}^{\dagger}, \qquad (\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)}\underline{M})^{\dagger} = -\underline{\underline{T}}_{e2}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})}\underline{M}^{\dagger}, \\ (\underline{\underline{T}}_{e2}^{AA^{\dagger}}\underline{M})^{\dagger} = \underline{\underline{T}}_{e2}^{AA^{\dagger}}\underline{M}^{\dagger}, \qquad (\underline{\underline{T}}_{e2}^{A(-A)}\underline{M})^{\dagger} = \underline{\underline{T}}_{e2}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})}\underline{M}^{\dagger}, \\ (\underline{\underline{T}}_{t}^{AA^{\dagger}}\underline{M})^{\dagger} = \underline{\underline{T}}_{t}^{AA^{\dagger}}\underline{M}^{\dagger}, \qquad (\underline{\underline{T}}_{t}^{A(-A)}\underline{M})^{\dagger} = \underline{\underline{T}}_{t}^{A^{\dagger}(-A^{\dagger})}\underline{M}^{\dagger},$$
(C.32)

wobe
i \underline{M} hier eine beliebige Matrix darstellt. Außerdem findet man die weiteren nützlichen Beziehungen

$$\underline{\underline{T}}_{e}^{(-A)A}\underline{\underline{M}} = -\underline{\underline{T}}_{e}^{A(-A)}\underline{\underline{M}} ,
\underline{\underline{T}}_{e2}^{(-A)A}\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{T}}_{e2}^{A(-A)}\underline{\underline{M}} ,
\underline{\underline{T}}_{t}^{(-A)A}\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{T}}_{t}^{A(-A)}\underline{\underline{M}} .$$
(C.33)

D Entwicklung der stochastischen Kräfte

D.1 Fourier-Transformation

Aus den Korrelationen des stochastischen Spannungstensors, wie er in Gleichung (2.31) eingeführt und in Anhang B.4 abgeleitet wurde, ergeben sich nach einer Fourier-Transformation in der Zeit und den drei Raumrichtungen die Komponenten

$$\langle \xi_{ik}(\omega_{1},\mathbf{k}_{1})\xi_{lm}(\omega_{2},\mathbf{k}_{2})\rangle =$$

$$\int d\mathbf{r}_{1} d\mathbf{r}_{2} \int dt_{1} dt_{2} e^{-i\mathbf{k}_{1}\mathbf{r}_{1}+i\omega_{1}t_{1}} e^{-i\mathbf{k}_{2}\mathbf{r}_{2}+i\omega_{2}t_{2}} \langle \xi_{ik}(t_{1},\mathbf{r}_{1})\xi_{lm}(t_{2},\mathbf{r}_{2})\rangle$$

$$= 2Q^{2}\nu \Big[(\delta_{il}\delta_{km}+\delta_{im}\delta_{kl}) + (\alpha-2)\delta_{ik}\delta_{lm} \Big]$$

$$\int d\mathbf{r}_{1} d\mathbf{r}_{2} \int dt_{1} dt_{2} e^{-i\mathbf{k}_{1}\mathbf{r}_{1}+i\omega_{1}t_{1}} e^{-i\mathbf{k}_{2}\mathbf{r}_{2}+i\omega_{2}t_{2}} \delta(\mathbf{r}_{1}-\mathbf{r}_{2})\delta(t_{1}-t_{2})$$

$$= 2Q^{2}\nu \Big[(\delta_{il}\delta_{km}+\delta_{im}\delta_{kl}) + (\alpha-2)\delta_{ik}\delta_{lm} \Big] \int d\mathbf{r}_{1} \int dt_{1} e^{-i(\mathbf{k}_{1}+\mathbf{k}_{2})\mathbf{r}_{1}+i(\omega_{1}+\omega_{2})t_{1}}$$

$$= 2Q^{2}\nu \Big[(\delta_{il}\delta_{km}+\delta_{im}\delta_{kl}) + (\alpha-2)\delta_{ik}\delta_{lm} \Big] \delta(\mathbf{k}_{1}+\mathbf{k}_{2})\delta(\omega_{1}+\omega_{2}) .$$

Führt man die Transformation nur in die x- und z-Raumrichtung durch, erhält man

$$\langle \xi_{ik}(\omega_1, \boldsymbol{\kappa}_1, y_1) \xi_{lm}(\omega_2, \boldsymbol{\kappa}_2, y_2) \rangle = 2Q^2 \nu (2\pi)^3 \left[(\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + (\alpha - 2) \delta_{ik} \delta_{lm} \right]$$
$$\delta(\boldsymbol{\kappa}_1 + \boldsymbol{\kappa}_2) \delta(\omega_1 + \omega_2) \delta(y_1 - y_2) . \quad (D.2)$$

_

Für die Divergenz der longitudinalen Komponente der Kraftdichte, wie sie in Anhang A definiert wurde,

$$H = \nabla \cdot \mathbf{F}^{S} = \partial_{l} \partial_{m} \xi_{lm}(\mathbf{r}, t) , \qquad (D.3)$$

mit $F_i^S = \partial_j \xi_{ik}$, erhält man nach einer Fourier-Transformation zusammen mit der Korrelation des stochastischen Spannungstensors (D.2) die Korrelation

$$\langle H(\omega, \mathbf{k}) H(\omega', \mathbf{k}') \rangle$$

$$= (ik_l)(ik_m)(ik'_j)(ik'_k) \langle \xi_{lm}(\omega, \mathbf{k}) \xi_{jk}(\omega', \mathbf{k}') \rangle$$

$$= 2Q^2 (2\pi)^4 k_l k_m k_j k_k \nu \Big[(\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + (\alpha - 2) \delta_{ik} \delta_{lm} \Big] \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta(\omega_1 + \omega_2)$$

$$= 2Q^2 (2\pi)^4 k^4 \nu \alpha \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta(\omega_1 + \omega_2)$$
(D.4)

_

und die ebenfalls in Anhang A
 definierten transversalen stochastischen Beiträge
 ${\bf G}=\nabla\times\nabla\times{\bf F}^S$ haben im Ortsraum die Komponenten

$$G_i(\mathbf{r},t) = \partial_i \partial_m \partial_l \xi_{ml}(\mathbf{r},t) - \partial_m^2 \partial_l \xi_{il}(\mathbf{r},t) , \qquad (D.5)$$

was nach einer Fourier-Transformation in drei Raumdimensionen zu

$$G_i(\mathbf{k}, t) = -ik_i k_m k_l \xi_{ml}(\mathbf{k}, t) + ik_m^2 k_l \xi_{il}(\mathbf{k}, t)$$
$$= ik^2 (\delta_{im} - \hat{k}_i \hat{k}_m) k_l \xi_{ml}(\mathbf{k}, t)$$
(D.6)

führt, womit ihre Korrelationen im unendlich ausgedehnten Raum durch

$$\langle G_{i}(\omega,\mathbf{k})G_{l}(\omega',\mathbf{k}')\rangle = -k^{2}k'^{2}(\delta_{ij}-\hat{k}_{i}\hat{k}_{j})(\delta_{lm}-\hat{k}_{l}'\hat{k}_{m}')k_{p}k_{n}'\langle\xi_{jp}(\omega,\mathbf{k})\xi_{mn}(\omega',\mathbf{k}')\rangle$$

$$= 2Q^{2}(2\pi)^{4}\nu k^{4}(\delta_{ij}-\hat{k}_{i}\hat{k}_{j})(\delta_{lm}-\hat{k}_{l}\hat{k}_{m})k_{p}k_{n}$$

$$\left[(\delta_{jm}\delta_{pn}+\delta_{jn}\delta_{pm})+(\alpha-2)\delta_{jp}\delta_{mn}\right]\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\delta(\omega+\omega')$$

$$= 2Q^{2}(2\pi)^{4}\nu k^{6}(\delta_{il}-\hat{k}_{i}\hat{k}_{l})\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\delta(\omega+\omega')$$
(D.7)

gegeben sind. In Vektorschreibweise nimmt der letzte Ausdruck die folgende Form an:

$$\langle \mathbf{G}(\omega,k)\mathbf{G}(\omega',k')\rangle = (2\pi)^4 2Q^2 (2\pi)^4 \nu k^6 (\underline{I} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\delta(\omega + \omega').$$
(D.8)

Die gemischte Korrelation $\langle H(\omega, \mathbf{k})G_j(\omega', \mathbf{k}')\rangle$, ebenso wie $\langle G_i(\omega, \mathbf{k})H(\omega', \mathbf{k}')\rangle$ verschwinden dagegen.

D.2 Entwicklung senkrecht zu den Wänden

Hier sollen die Korrelationen von $\mathbf{G}(\boldsymbol{\kappa}, y)$ und $H(\boldsymbol{\kappa}, y)$ in y-Richtung, senkrecht zu den Wänden, nach dem in Kapitel 5.1.3 eingeführten Funktionensystem $\varphi_{\alpha n}(y)$ entwickelt werden.

Zur Berechnung der longitudinalen Beiträge $H(\omega, \kappa, y)$ wird wie zuvor von der Beziehung (D.3) ausgegangen. Diese liefert nach einer Fourier-Transformation in der *xz*-Ebene und in der Zeit

$$H(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y) = -\kappa_x^2 \xi_{xx} + \partial_y^2 \xi_{yy} - \kappa_z^2 \xi_{zz} + 2i\partial_y (\kappa_x \xi_{xy} + \kappa_z \xi_{yz}) - 2\kappa_x \kappa_z \xi_{xz} \,. \tag{D.9}$$

Ebenso ergeben sich die Komponenten von $G_i(\omega, \kappa, y)$ aus (D.5) nach ebener Fourier-Transformation zu

$$G_{x}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y) = -i\kappa_{x} \left(\partial_{y}^{2} - \kappa_{z}^{2}\right) \xi_{xx} + i\kappa_{x} \partial_{y}^{2} \xi_{yy} - i\kappa_{x} \kappa_{z}^{2} \xi_{zz} + \left(\left(\kappa_{z}^{2} - \kappa_{x}^{2}\right)\partial_{y} - \partial_{y}^{3}\right) \xi_{xy} + i\kappa_{z}\left(\kappa_{z}^{2} - \kappa_{x}^{2} - \partial_{y}^{2}\right) \xi_{xz} - 2\kappa_{x}\kappa_{z} \partial_{y} \xi_{yz}, G_{y}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y) = -\kappa_{x}^{2} \partial_{y} \xi_{xx} + \left(\kappa_{z}^{2} + \kappa_{x}^{2}\right) \partial_{y} \xi_{yy} - \kappa_{z}^{2} \partial_{y} \xi_{zz} + i\kappa_{x}\left(\kappa_{z}^{2} + \kappa_{x}^{2} + \partial_{y}^{2}\right) \xi_{xy} - 2\kappa_{z}\kappa_{x} \partial_{y} \xi_{xz} + i\kappa_{z}\left(\kappa_{z}^{2} + \kappa_{x}^{2} + \partial_{y}^{2}\right) \xi_{yz}, G_{z}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y) = -i\kappa_{z}\kappa_{x}^{2} \xi_{xx} + i\kappa_{z} \partial_{y}^{2} \xi_{yy} - i\kappa_{z}\left(\partial_{y}^{2} - \kappa_{x}^{2}\right) \xi_{zz} - 2\kappa_{z}\kappa_{x} \partial_{y} \xi_{xy} + i\kappa_{x}\left(\kappa_{x}^{2} - \kappa_{z}^{2} - \partial_{y}^{2}\right) \xi_{xz} + \left(\left(\kappa_{x}^{2} - \kappa_{z}^{2}\right)\partial_{y} - \partial_{y}^{3}\right) \xi_{yz}.$$
(D.10)

Es wurden hier die Abhängigkeiten des stochastischen Spannungstensors von ω , κ und y wegen der besseren Übersichtlichkeit weggelassen.

Zur Berechnung der Korrelationen von (D.9) und (D.10) benötigt man noch die in der xz-Ebene Fourier-Transformierten Korrelationen des stochastischen Spannungstensors aus (D.2), die sich bei Betrachtung der möglichen Indexkombinationen auch wie folgt darstellen lassen,

$$\begin{aligned} \langle \xi_{ii}\xi_{ii} \rangle &= 2Q^2 \nu (2\pi)^3 \alpha \delta(\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}') \delta(\omega + \omega') \delta(y - y') \,, \\ \langle \xi_{ii}\xi_{jj} \rangle &= 2Q^2 \nu (2\pi)^3 (\alpha - 2) \delta(\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}') \delta(\omega + \omega') \delta(y - y') \qquad \text{für } i \neq j \,, \\ \langle \xi_{ij}\xi_{ij} \rangle &= 2Q^2 \nu (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}') \delta(\omega + \omega') \delta(y - y') \qquad \text{für } i \neq j \,, \end{aligned}$$

wobei alle anderen Kombinationen unkorreliert sind.

Man kann die Korrelationen der Beiträge $H(\omega, \kappa, y)$ und $G_i(\omega, \kappa, y)$ in kompakter Form wie folgt darstellen,

$$\langle H(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y)H(\omega', \boldsymbol{\kappa}', y')\rangle = (2\pi)^3 \bar{H}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y')\delta(\omega + \omega')\delta(\boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}')\delta(y - y')$$
(D.11)

und

$$\langle G_i(\omega,\boldsymbol{\kappa},y)G_j(\omega',\boldsymbol{\kappa'},y')\rangle = (2\pi)^3 \bar{G}_{ij}(\omega,\boldsymbol{\kappa},y,y')\delta(\omega+\omega')\delta(\boldsymbol{\kappa}+\boldsymbol{\kappa'})\delta(y-y') , \quad (D.12)$$

worin $\bar{H}(\omega, \kappa, y, y')$ und die Matrix mit den Komponenten $\bar{G}_{ij}(\omega, \kappa, y, y')$ eingeführt wurden und die im Folgenden aufgelistet sind:

$$\bar{H}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = \alpha \kappa^4 + \alpha (\partial_y^2 \partial_y'^2 - \kappa^2 (\partial_y^2 + \partial_y'^2)) + 2\kappa^2 (\partial_y + \partial_y')^2, \qquad (D.13)$$

$$\bar{G}_{xx}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = 2Q^2 \nu \Big(\partial_y^3 \partial_{y'}^3 + (\kappa_x^2 - \kappa_z^2) \big(\partial_y \partial_{y'}^3 \partial_y^3 \partial_{y'}\big) + (4\kappa_x^2 + \kappa_z^2) \partial_y^2 \partial_{y'}^2 \\ - \kappa^2 \kappa_z^2 \big(\partial_{y'}^2 + \partial_y^2\big) + \kappa^4 \partial_y \partial_{y'} + \kappa_z^2 \kappa^4 \,, \tag{D.14}$$

$$\bar{G}_{yy}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = 2Q^2 \nu \left(\kappa^2 \partial_y^2 \partial_{y'}^2 + \kappa^4 \left(\partial_{y'}^2 + 4 \partial_y \partial_{y'} + \partial_y^2 \right) + \kappa^6 \right), \qquad (D.15)$$

$$\bar{G}_{zz}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = 2Q^2 \nu \left(\partial_y^3 \partial_{y'}^3 - (\kappa_x^2 - \kappa_z^2) \left(\partial_y \partial_{y'}^3 + \partial_y^3 \partial_{y'} \right) + (\kappa_x^2 + 4\kappa_z^2) \partial_y^2 \partial_{y'}^2 + \kappa^4 \partial_y \partial_{y'} - \kappa_x^2 \kappa^2 \left(\partial_{y'}^2 + \partial_y^2 \right) + \kappa_x^2 \kappa^4 \right), \quad (D.16)$$

$$\bar{G}_{xy}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = 2Q^2 \nu i \kappa_x \left(\partial_y^3 \partial_{y'}^2 + \kappa^2 \left(\partial_y \partial_{y'}^2 + 4 \partial_y^2 \partial_{y'} + \partial_y^3 \right) + \kappa^4 \partial_y \right), \tag{D.17}$$

$$\bar{G}_{yx}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = G_{xy}^*(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = -2Q^2 \nu i \kappa_x \left(\partial_y^2 \partial_{y'}^3 \kappa^2 (\partial_{y'}^3 + 4\partial_y \partial_{y'}^2 + \partial_y^2 \partial_{y'}) + \kappa^4 \partial_{y'} \right),$$
(D.18)

159

$$\bar{G}_{zy}(\omega, \kappa, y, y') = 2Q^2 \nu i \kappa_z \left(\partial_y^3 \partial_{y'}^2 + \kappa^2 \left(\partial_y \partial_{y'}^2 + 4 \partial_y^2 \partial_{y'} + \partial_y^3 \right) + \kappa^4 \partial_y \right), \tag{D.19}$$

$$\bar{G}_{yz}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = -2Q^2 \nu i \kappa_z \left(\partial_y^2 \partial_{y'}^3 + \kappa^2 \left(\partial_{y'}^3 + 4 \partial_y \partial_{y'}^2 + \partial_y^2 \partial_{y'} \right) + \kappa^4 \partial_{y'} \right)$$

= $G_{yz}^*(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y')$, (D.20)

und

$$\bar{G}_{zx}(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y') = 2Q^2 \nu \kappa_x \kappa_z \left(2\partial_y \partial_{y'}^3 + 2\partial_{y'} \partial_y^3 + 3\partial_y^2 \partial_{y'}^2 + \kappa^2 \left(\partial_{y'}^2 + \partial_y^2 \right) - \kappa^4 \right)$$

= $G_{xz}^*(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y, y')$. (D.21)

Entwicklung nach der Galerkin-Methode. Bei der Projektion auf das Funktionensystem im Rahmen der in Abschnitt 5.1.4 eingeführten Galerkin-Methode ist Vorsicht geboten, da eine Änderung der Reihenfolge der Ableitungen unter den Projektionsintegralen zu unterschiedlichen Ergebnissen führen kann.

Ist die Korrelation durch eine allgemeine Funktion $C(y, y') = \partial_y^k \partial_y'^l \delta(y - y')$ gegeben, so kann man zum einen die Projektion wie folgt interpretieren,

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \varphi_{(\alpha n)}(y) \int dy' \varphi_{(\beta m)}(y') C(y, y')$$

$$= \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \varphi_{(\alpha n)}(y) \int dy' \varphi_{(\beta m)}(y') \partial_y^k \partial_y'^l \delta(y - y'),$$
(D.22)

zum anderen kann man auch, da sich die Korrelation ja aus dem Produkt zweier Funktionen zusammensetzt, die Interpretation

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \varphi_{(\alpha n)}(y) \partial_y^k \int dy' \varphi_{(\beta m)}(y') \partial_y'^l \delta(y-y')$$
(D.23)

wählen. Mit Hilfe der Beziehung

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy' f(y')\partial_{y'}^k \delta(y-y') = \left(\Theta\left(y+\frac{d}{2}\right) - \Theta\left(y2-\frac{d}{2}\right)\right)(-1)^k \partial_y^k f(y) \tag{D.24}$$

erhält man für die erste Variante (D.22) die Lösung

$$(-1)^{l} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \varphi_{(\alpha n)}(y) \partial_{y}^{k+l} \varphi_{(\beta m)}(y)$$
(D.25)

während für die zweite Variante (D.23), wie im Folgenden gezeigt, ein zusätzlicher Beitrag hinzukommt:

Das erste Integral in der letzte Zeile entspricht also gerade der Lösung (D.25) für die erste Variante (D.22). Der letzte Ausdruck liefert zusammen mit (D.24) genau dann einen Beitrag, falls die entsprechende Anzahl an Ableitungen der Entwicklungsfunktion am Rand nicht verschwindet. Im Falle der in Kapitel 5.4 eingeführten speziellen Entwicklungsfunktionen ist genau dies der Fall.

Da das Interesse vordergründig in Bulk-Effekten liegt und der zusätzliche Beitrag in der zweiten Variante (D.26) durch die Ränder auftritt und es außerdem die Rechnung insgesamt leichter gestaltet, soll im weiteren Verlauf die Gleichung (D.22) zur Lösung der Korrelation der stochastischen Kräfte benutzt werden.

Die durch Projektion auf die Entwicklungsfunktionen gewonnenen Entwicklungskoeffizienten der Korrelationen werden zunächst allgemein wie folgt bezeichnet:

$$\langle HH \rangle_{(\alpha n)(\beta m)} = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \ \varphi_{\alpha n}(y) H(\omega, \kappa, y') \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy' \ \varphi_{\beta m}(y) H(\omega, \kappa, y) \delta(y - y') \,. \tag{D.27}$$

und

$$\langle G_i G_j \rangle_{(\alpha n)(\beta m)} = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \ \varphi_{\alpha n}(y) G_i(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y') \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy' \ \varphi_{\beta m}(y) G_j(\omega, \boldsymbol{\kappa}, y') \delta(y - y') \,.$$
(D.28)

Die Korrelation der in Abschnitt 5.1.4 unter (5.19) eingeführten Entwicklungskoeffizienten $\mathsf{P}_{(\alpha ni)}$, welche nach (5.7) Funktionen der oben beschriebenen H und G_i sind, lassen sich dann wie folgt schreiben

$$\langle \mathsf{PP} \rangle_{(\alpha n)(\beta m)} = 2Q^2 \nu (2\pi)^3 \delta(\kappa + \kappa') \delta(\omega + \omega')$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa^2 \langle HH \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle G_x G_x \rangle & \langle G_x G_y \rangle & \langle G_x G_z \rangle \\ 0 & 0 & \langle G_y G_x \rangle & \langle G_y G_y \rangle & \langle G_y G_z \rangle \\ 0 & 0 & \langle G_z G_x \rangle & \langle G_z G_y \rangle & \langle G_z G_z \rangle \end{pmatrix}_{(\alpha n)(\beta m)} (D.29)$$

Diese Koeffizenten lassen sich in der im Abschnitt 5.1.5 beschriebenen Art zu einer Matrix $\langle \mathbb{P}(\omega, \kappa) \mathbb{P}(\omega', \kappa') \rangle$ zusammenfassen.

E Entwicklungskoeffizienten

An dieser Stelle werden die Entwicklungskoeffizienten $J_{(\alpha ni)(\beta lj)}$ und $M_{(\alpha ni)(\beta lj)}$ aus Abschnitt 5.19 zunächst unter der Annahme, dass $\varphi_{\alpha n}(y)$ ein allgemeines orthogonales Funktionensystem darstellt, entwickelt. Im Abschnitt E.2 werden dann die Ergebnisse durch das System der harmonischen Funktionen aus Abschnitt 5.4.1 dargestellt.

Entsprechend der Gleichungen (5.19) definieren wir die Entwicklungskoeffizienten der verschiedenen Operatoren wie folgt:

$$\partial_y^{\nu}\varphi_{-l}(y) = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_{-k}(y)\bar{\Psi}_{kl}^{(\nu)} + \varphi_{\sim k}(y)\tilde{\Psi}_{kl}^{(\nu)}, \qquad (E.1a)$$

$$\partial_y^{\nu}\varphi_{\sim l}(y) = \sum_{k=1}^{\infty}\varphi_{-k}(y)\bar{\Phi}_{kl}^{(\nu)} + \varphi_{\sim k}(y)\tilde{\Phi}_{kl}^{(\nu)}, \qquad (E.1b)$$

$$y^{\mu}\varphi_{-l}(y) = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_{-k}(y)\tilde{\Upsilon}_{kl}^{(\mu)} + \varphi_{\sim k}(y)\tilde{\Upsilon}_{kl}^{(\mu)}, \qquad (E.1c)$$

$$y^{\mu}\varphi_{\sim l}(y) = \sum_{k=1}^{\infty}\varphi_{-k}(y)\bar{\Pi}_{kl}^{(\mu)} + \tilde{\varphi}_{k}(y)\tilde{\Pi}_{kl}^{(\mu)}, \qquad (E.1d)$$

$$y^{\mu}\partial_{y}^{\nu}\varphi_{-l}(y) = \sum_{k=1}^{\infty}\varphi_{-k}(y)\bar{\Lambda}_{kl}^{(\mu,\nu)} + \varphi_{\sim k}(y)\tilde{\Lambda}_{kl}^{(\mu,\nu)}, \qquad (E.1e)$$

$$y^{\mu}\partial_{y}^{\nu}\varphi_{\sim l}(y) = \sum_{k=1}^{\infty}\varphi_{-k}(y)\bar{\Xi}_{kl}^{(\mu,\nu)} + \varphi_{\sim k}(y)\tilde{\Xi}_{kl}^{(\mu,\nu)} \dots$$
(E.1f)

Hierbei ist, abhängig von der Symmetrie der Entwicklungsfunktionen, für spezielle ν und μ immer nur einer der Koeffizienten ungleich Null. Zum Beispiel ist die erste Ableitung nach y der bezüglich y symmetrischen Entwicklungsfunktion $\varphi_{-,l}(y)$ in (E.1a) antisymmetrisch und somit $\overline{\Psi}_{lk}^{(1)} = 0$.

Die einzelnen Koeffizienten erhält man dann, entsprechend der Gleichung (5.19), am Beispiel der einfachen Ableitung nach y, durch die Projektion:

$$\langle \varphi_{\sim n}(y), \left[\partial_y^1 \varphi_{-,l}(y)\right] \rangle_d = \sum_k \langle \varphi_{\sim n}(y), \varphi_{\sim k}(y) \rangle_d \tilde{\Psi}_{kl}^{(1)} = \tilde{\Psi}_{nl}^{(1)} .$$
(E.2)

Insbesondere kann man den Laplace-Operator $\triangle_{\kappa y} := -(\kappa^2 - \partial_y)^2$ in einer gewählten Funktionenbasis elementweise wie folgt darstellen:

$$\Delta_{\kappa,-nl} = -\left(\kappa^2 \delta_{nl} - \langle \varphi_{-n}(y) \left[\partial_y^2 \varphi_{-l}(y) \right] \rangle_d \right) = -\left(\kappa^2 \delta_{nl} - \bar{\Psi}_{nl}^{(2)}\right),$$

$$\Delta_{\kappa,\sim nl} = -\left(\kappa^2 \delta_{nl} - \langle \varphi_{\sim n}(y) \left[\partial_y^2 \varphi_{\sim l}(y) \right] \rangle_d \right) = -\left(\kappa^2 \delta_{nl} - \bar{\Psi}_{nl}^{(2)}\right).$$
 (E.3)

E.1 Matrixoperatoren

Mit Hilfe der Darstellungen (E.1) nehmen die Matrix operatoren (5.8)-(5.10) folgende Form an:

$$\underline{\mathbb{J}}_{(\alpha n)(\beta l)} = \delta_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \delta_{nl} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \triangle_{\kappa,\alpha nl} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \triangle_{\kappa,\alpha nl} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \triangle_{\kappa,\alpha nl} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \triangle_{\kappa,\alpha nl} \end{pmatrix}, \quad (E.4)$$

$$\underline{\mathbf{M}}_{0,(\alpha n)(\beta l)} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\kappa} \Delta_{\kappa,\alpha nl} & 0 & 0 & 0\\ i\kappa c^2 \Delta_{\kappa,\alpha nl} & -\nu \alpha \Delta_{\kappa,\alpha nl}^2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\nu \Delta_{\kappa,\alpha nl}^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -\nu \Delta_{\kappa,\alpha nl}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\nu \Delta_{\kappa,\alpha nl}^2 \end{pmatrix}, \quad (E.5)$$

$$\underline{\mathbb{M}}_{g,(\alpha n)(\alpha l)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\kappa\kappa_x\delta_{nl} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_{\kappa,\alpha nl} + 2\kappa_x^2\delta_{nl} & 0 \\ 0 & -\frac{\kappa_x}{\kappa}\Delta_{\kappa,\alpha nl} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\kappa_x\kappa_z\delta_{nl} & 0 \end{pmatrix}, \quad (E.6)$$

$$\underline{\mathbb{M}}_{g,(-n)(\sim l)} = \begin{pmatrix} i\kappa_x \bar{\Pi}_{nl}^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\kappa_x (\bar{L}_{nl} + 2\bar{\Phi}_{nl}^{(1)}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{i}{\kappa} (\kappa^2 \bar{\Phi}_{nl}^{(1)} - \bar{\Phi}_{nl}^{(3)}) & i\kappa_x (\bar{L}_{nl} + 2\bar{\Phi}_{nl}^{(1)}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\kappa_x \bar{L}_{nl} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\kappa_x (\bar{L}_{nl} + 2\bar{\Phi}_{nl}^{(1)}) \end{pmatrix},$$
(E.7)
$$\underline{\mathbb{M}}_{g,(\sim n)(-l)} = \begin{pmatrix} i\kappa_x \tilde{\Upsilon}_{nl}^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\kappa_x (\tilde{L}_{nl} + 2\tilde{\Psi}_{nl}^{(1)}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\kappa_x (\tilde{L}_{nl} + 2\tilde{\Psi}_{nl}^{(1)}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{i}{\kappa} (\kappa^2 \tilde{\Psi}_{nl}^{(1)} - \tilde{\Psi}_{nl}^{(3)}) & i\kappa_x (\tilde{L}_{nl} + 2\tilde{\Psi}_{nl}^{(1)}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\kappa_x \tilde{L}_{nl} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\kappa_x (\tilde{L}_{nl} + 2\tilde{\Psi}_{nl}^{(1)}) \end{pmatrix}.$$
(E.8)

mit

$$\bar{L}_{nl} = -\kappa^2 \bar{\Pi}_{nl}^{(1)} + \bar{\Xi}_{nl}^{(1,2)},$$

$$\tilde{L}_{nl} = -\kappa^2 \tilde{\Upsilon}_{nl}^{(1)} + \tilde{\Lambda}_{nl}^{(1,2)}.$$
(E.9)

E.1 Matrixoperatoren

E.2 Haftende Randbedingungen

Mit der Wahl des speziellen Funktionensystems aus Abschnitt (5.4.1) ergeben sich die folgenden Darstellungen, wobei die zusätzlichen Anteile im kompressiblen Fall ebenfalls berücksichtigt werden:

$$\tilde{\Psi}_{nl}^{(1)} = \langle \varphi_{\sim n}(y), \partial_y \varphi_{-l}(y) \rangle_d = -\frac{4}{d} (-1)^{l+n} \frac{K_{-l} K_{\sim n}}{K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2}, \qquad (E.10a)$$

$$\bar{\Phi}_{nl}^{(1)} = \langle \varphi_{-n}(y), \partial_y \varphi_{\sim l}(y) \rangle_d = \frac{4}{d} (-1)^{l+n} \frac{K_{-n} K_{\sim l}}{K_{\sim l}^2 - K_{-n}^2}, \qquad (E.10b)$$

$$\bar{\Psi}_{nl}^{(2)} = \langle \varphi_{-n}(y), \partial_y^2 \varphi_{-l}(y) \rangle_d = -K_{-l}^2 \delta_{nl} , \qquad (E.11a)$$

$$\tilde{\Phi}_{nl}^{(2)} = \langle \varphi_{\sim n}(y), \partial_y^2 \varphi_{\sim l}(y) \rangle_d = -K_{\sim l}^2 \delta_{nl} \,, \,$$
(E.11b)

$$\tilde{\Psi}_{nl}^{(3)} = \langle \varphi_{\sim n}(y), \partial_y^3 \varphi_{-l}(y) \rangle_d = \frac{4}{d} (-1)^{l+n} K_{-l}^2 \frac{K_{-l} K_{\sim n}}{K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2}, \qquad (E.12a)$$

$$\bar{\Phi}_{nl}^{(3)} = \langle \varphi_{-n}(y), \partial_y^3 \varphi_{\sim l}(y) \rangle_d = -\frac{4}{d} (-1)^{l+n} K_{\sim l}^2 \frac{K_{-n} K_{sl}}{K_{\sim l}^2 - K_{-n}^2}, \qquad (E.12b)$$

$$\tilde{\Upsilon}_{nl}^{(1)} = \langle \varphi_{\sim n}(y), y \, \varphi_{-l}(y) \rangle_d = \frac{8}{d} (-1)^{l+n} \frac{K_{-l} K_{\sim n}}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2} \,, \tag{E.13a}$$

$$\bar{\Pi}_{nl}^{(1)} = \langle \varphi_{-n}(y), y \, \varphi_{\sim l}(y) \rangle_d = \frac{8}{d} (-1)^{l+n} \frac{K_{-n} K_{\sim l}}{(K_{\sim l}^2 - K_{-n}^2)^2} \,, \tag{E.13b}$$

$$\tilde{\Lambda}_{nl}^{(1,2)} = \langle \varphi_{\sim n}(y), y \partial_y^2 \varphi_{-l}(y) \rangle_d = -\frac{8}{d} (-1)^{l+n} K_{-l}^2 \frac{K_{-l} K_{\sim n}}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2}, \qquad (E.14a)$$

$$\bar{\Xi}_{nl}^{(1,2)} = \langle \varphi_{-n}(y), y \partial_y^2 \varphi_{\sim l}(y) \rangle_d = -\frac{8}{d} (-1)^{l+n} K_{\sim l}^2 \frac{K_{-n} K_{\sim l}}{(K_{\sim l}^2 - K_{-n}^2)^2}, \qquad (E.14b)$$

Der Laplace-Operator wird dann mit $M_{\alpha l}^2 = \kappa^2 + K_{\alpha l}^2$ zu

$$\bar{\Delta}_{k,nl} = -\delta_{nl} (\kappa^2 + K_{-l}^2) = -\delta_{nl} M_{-l}^2 ,$$

$$\tilde{\Delta}_{k,nl} = -\delta_{nl} (\kappa^2 + K_{\sim l}^2) = -\delta_{nl} M_{\sim l}^2 ,$$
(E.15)

und für die Abkürzungen in (E.9) erhält man im System der harmonischen Funktionen

$$\bar{L}_{nl} = -\frac{8}{d} (-1)^{n+l} M_{\sim l}^2 \frac{K_{-n} K_{\sim l}}{(K_{\sim l}^2 - K_{-n}^2)^2},$$

$$\tilde{L}_{nl} = -\frac{8}{d} (-1)^{n+l} M_{-l}^2 \frac{K_{-l} K_{\sim n}}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2}.$$
 (E.16)

166

Matrizen der Bewegungsgleichungen

Die Matrizen aus Abschnitt E.1 lauten somit:

$$\underline{\mathbb{J}}_{(\alpha n)(\beta l)} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{nl} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -M_{\alpha n}^2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -M_{\alpha n}^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -M_{\alpha n}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & -M_{\alpha n}^2 \end{pmatrix}, \quad (E.17)$$

$$\underline{A}_{(\alpha n)(\beta l)} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{nl} \begin{pmatrix} 0 & \frac{i}{\kappa}M_{\alpha n}^2 & 0 & 0 & 0\\ i\kappa c^2 & \nu\alpha M_{\alpha n}^2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \nu M_{\alpha n}^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \nu M_{\alpha n}^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu M_{\alpha n}^2 \end{pmatrix}, \quad (E.18)$$

$$\underline{\mathbb{B}}_{(\alpha n)(\alpha l)} = \delta_{nl} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\frac{\kappa\kappa_x}{M_{\alpha n}^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left(1 - 2\frac{\kappa_x}{M_{\alpha n}^2}\right) & 0 \\ 0 & -\frac{\kappa_x}{\kappa} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\frac{\kappa_x\kappa_z}{M_{\alpha n}^2} & 0 \end{pmatrix} , \qquad (E.19)$$

$$\underline{\mathbb{B}}_{(-n)(\sim l)} = \frac{8}{d} (-1)^{n+l} i \kappa_x \frac{K_{-n} K_{\sim l}}{(K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{K_{-n}^2 - K_{\sim l}^2}{2\kappa_x \kappa} \frac{M_{\sim l}^2}{M_{-n}^2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{M_{\sim l}^2}{M_{-n}^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (E.20)$$

$$\underline{\mathbb{B}}_{(\sim n)(-l)} = \frac{8}{d} (-1)^{n+l} i \kappa_x \frac{K_{\sim n} K_{-l}}{(K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{K_{\sim n}^2 - K_{-l}^2}{2\kappa_x \kappa} \frac{M_{-l}^2}{M_{\sim n}^2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{M_{-l}^2}{M_{\sim n}^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (E.21)$$

167

E.2.1 Stochastischer Spannungstensor

Die Korrelationsmatrizen der Entwicklungskoeffizienten der stochastischen Beiträge, wie sie in Gleichung (5.35) eingeführt wurden, ergeben sich mit Hilfe der Darstellung von $\underline{\mathbb{J}}$ aus (E.17) und der in Abschnitt D.2 eingeführten Matrix $\langle \mathbb{P}(\omega, \boldsymbol{\kappa}) \mathbb{P}(\omega', \boldsymbol{\kappa}') \rangle$ aus

$$\underline{\mathbb{K}} = \underline{\mathbb{J}}^{-1} \langle \mathbb{P}(\omega, \boldsymbol{\kappa}) \mathbb{P}(\omega', \boldsymbol{\kappa}') \rangle \underline{\mathbb{J}}^{-T}$$
(E.22)

mit den Koeffizientenmatrizen

$$\mathbb{K}_{(-n)(-m)} = 2Q^2 \nu \delta_{nm} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha \kappa^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (M_{-n}^2 - \kappa_x^2) & 0 & -\kappa_x \kappa_z \\ 0 & 0 & 0 & \kappa^2 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa_x \kappa_z & 0 & (M_{-n}^2 - \kappa_z^2) \end{pmatrix}, \quad (E.23)$$

$$\mathbb{K}_{(\sim n)(\sim m)} = 2Q^2 \nu \delta_{nm} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha \kappa^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (M_{\sim n}^2 - \kappa_x^2) & 0 & -\kappa_x \kappa_z \\ 0 & 0 & 0 & \kappa^2 & 0 \\ 0 & 0 & -\kappa_x \kappa_z & 0 & (M_{\sim n}^2 - \kappa_z^2) \end{pmatrix}, \quad (E.24)$$

F Besselfunktionen

Durch den gewählten Lösungsweg für die Bewegungsgleichungen, mit planarer Fourier-Transformation in der x- und z-Richtung, und Reihenentwicklung in y-Richtung, liegen die Korrelationen in Form von Koeffizientenmatrizen $\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t)$ vor. Die einzelnen Elemente der Matrix, die vom ebenen Wellenzahlvektor $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_x, 0, \kappa_z)$ abhängen, sollen in diesem Kapitel in den Ortsraum zurücktransformiert werden.

F.1 Fourier-Transformation in der Ebene

Sei jetzt $C(\boldsymbol{\kappa})$ eine allgemeine Funktion im ebenen Wellenzahlraum, zum Beispiel einer der Entwicklungskoeffizienten der Korrelationsmatrix $\underline{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\kappa},t)$. Diese Funktion $C(\boldsymbol{\kappa})$ hängt im Allgemeinen nicht nur vom Betrag von $\boldsymbol{\kappa} = |\boldsymbol{\kappa}|$, sondern auch von den kartesischen Richtungen $\hat{\boldsymbol{\kappa}} = \frac{\boldsymbol{\kappa}}{\kappa}$ ab. Die Rücktransformation in den ebenen Ortsraum $\mathbf{r} = (r_x, 0, r_z)$, mit $r = |\mathbf{r}|$, erfolgt mittels des folgenden Fourier-Integrals,

$$C(\mathbf{r}) = \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^2} C(\boldsymbol{\kappa}) e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} \,. \tag{F.1}$$

Die einzelne Fouriermoden haben also, wegen dem Argument $i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}$ der Exponentialfunktion, in Abhängigkeit von ihrer Orientierung zum Ortsvektor \mathbf{r} ein unterschiedliches Gewicht im Integral. Zum Lösen des Integrals ist es daher zweckmäßig die Komponenten des Wellenzahlvektors $\boldsymbol{\kappa}$ relativ zu ihrer Orientierung von \mathbf{r} darzustellen. Da das Integral (F.1) den kompletten $\boldsymbol{\kappa}$ -Raum einschließt, ist die Integration als solche unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems, es müssen jedoch die kartesischen Komponenten von $\boldsymbol{\kappa}$ im transformierten Koordinatensystem dargestellt werden. Hierzu wird das Koordinatensystem mittels einer Drehmatrix

$$\underline{D}_{\Theta} = \begin{pmatrix} \cos\Theta & 0 & -\sin\Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\Theta & 0 & \cos\Theta \end{pmatrix}$$
(F.2)

derart gedreht, dass der Vektor **r** in Richtung der z-Achse orientiert ist, $\mathbf{r}' = \underline{D}_{\Theta} \cdot \mathbf{r} = (0, 0, r)$. Die Komponenten des Wellenzahlvektors in dem neuen Koordinatensystem seien jetzt so gewählt, $\boldsymbol{\kappa}' = \kappa(\sin\vartheta, 0, \cos\vartheta)$, dass $\boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{r}' = \kappa r \cos\vartheta$ gilt. Durch eine Rückrotation mit $\underline{D}_{\Theta}^{T}$ lassen sich die Komponenten $\boldsymbol{\kappa}$ im ursprünglichen Koordinatensystem darstellen

als

$$\boldsymbol{\kappa} = \underline{D}_{\Theta}^{T} \boldsymbol{\kappa}' = \kappa \begin{pmatrix} \cos \Theta \sin \vartheta + \sin \Theta \cos \vartheta \\ \cos \Theta \cos \vartheta - \sin \Theta \sin \vartheta \end{pmatrix}$$
(F.3)

und es gilt auch hier $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r} = \kappa r \cos \vartheta$.

Die durch Θ und ϑ dargestellten Komponenten von κ setzt man jetzt in die Funktion $C(\kappa) = C(\kappa, \Theta, \vartheta)$ ein und das Fourier-Integral (F.1) erhält die folgende Form:

$$C(r,\Theta) = \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \kappa \int_0^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} C(\kappa,\Theta,\vartheta) e^{i\kappa r\cos\vartheta} \,. \tag{F.4}$$

Da die Funktion $C(\kappa, \Theta, \vartheta)$ aus Produkten unterschiedlicher Potenzen von sin ϑ und $\cos \vartheta$ besteht, sollen jetzt systematisch die Fourier-Integrale über diese Funktionen berechnet werden.

F.2 Darstellung durch Besselfunktionen

Betrachtet man zunächst den Fall $C(\kappa, \Theta, \vartheta) = C(\kappa, \Theta)$, falls die Funktion unabhängig von ϑ ist, so kann man das innere Integral von (F.3) in zwei Integrale aufspalten, so dass sich die folgende Darstellung ergibt,

$$C(\kappa,\Theta) \int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{ikr\cos\vartheta} = C(\kappa,\Theta) \left[\int_{0}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{ikr\cos\vartheta} + \int_{\pi}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{ikr\cos\vartheta} \right]$$
$$= 2C(\kappa,\Theta) \int_{0}^{\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \cos(kr\cos\vartheta) \,. \tag{F.5}$$

Hierfür findet man nach [66, 9.1.18] die Lösung

$$C(\kappa,\Theta) \int_0^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{ikr\cos\vartheta} = C(\kappa,\Theta) J_0(kr)$$
(F.6)

mit der Besselfunktion der ersten Art $J_0(x)$. Die Besselfunktionen erster Art $J_n(z)$, mit der natürlichen Zahl n und der positive reellen Zahl z, lassen sich unter anderem auch durch die folgende unendliche Reihe darstellen [66, 9.1.10]:

$$J_n(z) = \left(\frac{1}{2}z\right)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{1}{4}z^2\right)^k}{k!\Gamma(n+k+1)},$$
(F.7)

wobei $\Gamma(n)$ die Gammafunktion [66] ist.

Die ϑ -abhängige Funktion $C(\kappa, \Theta, \vartheta)$ lässt sich für gerade Potenzen in sin ϑ durch ausnutzen der Beziehung sin² $\vartheta = 1 - \cos^2 \vartheta$ alleine durch Potenzen von $\cos^n \vartheta$ darstellen und für ungerade Potenzen auf die Form $\cos^n \vartheta \sin \vartheta$ bringen.
b(artheta)	$\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \ b(\vartheta) e^{i\kappa r \cos(\vartheta)}$
1	$J_0(z)$
$\cos(artheta)$	$-i\partial_z J_0(z) = iJ_1(z)$
$\cos(\vartheta)^2$	$-i\partial_z iJ_1(z) = J_0(z) - \frac{J_1(z)}{z}$
$\cos(\vartheta)^3$	$-i\partial_z \left(J_0(z) - \frac{J_1}{z} \right) = iJ_1(z) \left(1 - \frac{2}{z^2} \right) + i\frac{J_0(z)}{z}$
$\cos(\vartheta)\sin(\vartheta)^2$	$2i\frac{J_1(z)}{z^2} - i\frac{J_0(z)}{z}$
$\sin(\vartheta)^2$	$\frac{J_1(z)}{z}$

Tabelle F.1: Die Lösung des Integrals $\int_0^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} b(\vartheta) e^{i\kappa r \cos(\vartheta)}$ für verschiedene $b(\vartheta)$.

Mit Hilfe der folgenden Spezialfälle lassen sich somit alle möglichen Kombinationen der Funktionen $a(\Psi, \kappa, \theta)$, mit z = kr, konstruieren:

$$\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \cos^{n}\vartheta \ e^{iz\cos\vartheta} = \left(\frac{1}{i}\right)^{n} \partial_{z}^{n} \int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} e^{iz\cos\vartheta} = (-i)^{n} \partial_{z}^{n} J_{0}(z) \tag{F.8}$$

Die Ableitungen von $J_0(z)$ erhält man mit Hilfe der Regeln [66, 9.1.29],

$$\partial_z \left(z^p J_\nu(z) \right) = z^p J_{\nu-1}(z) + (p-\nu) z^{(p-1)} J_\nu(z) ,$$

$$\partial_z \left(z^p J_\nu(z) \right) = -z^p J_{\nu+1}(z) + (p+\nu) z^{(p-1)} J_\nu(z) .$$
(F.9)

Da das Integral über $\sin \vartheta$,

$$\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \sin\vartheta \ e^{iz\cos\vartheta} = \frac{i}{z} \int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \partial_{\vartheta} e^{iz\cos\vartheta} = 0, \qquad (F.10)$$

verschwindet, sind außerdem auch alle Beiträge der Form

$$\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \cos^{n}\vartheta \,\sin\vartheta \,e^{iz\cos\vartheta} = (1/i)^{n}\partial_{z}^{n}\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \sin\vartheta \,e^{iz\cos\vartheta} = 0\,,$$
$$\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} \sin^{(2n)}\vartheta \,\sin\vartheta \,e^{iz\cos\vartheta} = (1/i)^{n}\partial_{z}^{n}\int_{0}^{2\pi} \frac{d\vartheta}{2\pi} (1-\cos^{2}\vartheta)^{n}\sin\vartheta \,e^{iz\cos\vartheta} = 0 \quad (F.11)$$

gleich Null. In der Tabelle F.1 sind die bei der Berechnung der Entwicklungskoeffizienten häufig auftretenden Fälle aufgeführt. Zur vollständigen Lösung von Gleichung (F.4) und damit des Fourier-Integrals (F.1) muß noch die Integration der so entstandenen Besselfunktionen über den Betrag des Wellenzahlvektors κ durchgeführt werden.

Es soll hier zunächst der Spezialfall einer von κ und ϑ unabhängigen Funktion $C(\Theta, \kappa, \vartheta) = C(\Theta)$ betrachtet werden. Zum einen findet man dann das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\boldsymbol{\kappa}'}{(2\pi)^2} C(\Theta) e^{i\boldsymbol{\kappa}'\cdot\mathbf{r}'} = C(\Theta) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^2} e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} = C(\Theta)\delta(\mathbf{r}), \qquad (F.12)$$

und zum anderen gilt in Zylinderkoordinaten dargestellt

$$\int_0^\infty \frac{d\kappa}{(2\pi)^2} C(\Theta) e^{i\kappa \cdot \mathbf{r}} = C(\Theta) \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \kappa J_0(\kappa r) \,. \tag{F.13}$$

Ein Vergleich impliziert demnach eine Dirac-Delta Funktion

$$C(\Theta) \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \kappa J_0(\kappa r) := C(\Theta) \tilde{\delta}(\mathbf{r}) \,. \tag{F.14}$$

Es soll im folgenden die Funktion $\tilde{\delta}(\mathbf{r})$ mittels

$$\tilde{\delta}(\mathbf{r}) := \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \kappa J_0(\kappa r) \tag{F.15}$$

definiert werden, wobei das Flächenintegral über $\tilde{\delta}(\mathbf{r})$ wie folgt zu bestimmen ist:

$$\int_0^\infty dr \int_0^\infty dk kr J_0(kr) = -\int_0^\infty dr \int_0^\infty dk \partial_r \partial_k J_0(kr)$$
$$= \lim_{x \to \infty} (J_0(0 \cdot x) - J_0(x)) \to 1.$$
(F.16)

Für $C(\Theta) = \cos^2 \Theta$ gilt hingegen

$$\int d\mathbf{r} \cos^2 \Theta \tilde{\delta}(\mathbf{r}) = \int_0^{2\pi} d\Theta \cos^2 \Theta \int_0^\infty dr \int_0^\infty \frac{dk}{2\pi} kr J_0(kr)$$
$$= \frac{1}{2} \int_0^\infty dr \int_0^\infty dk kr J_0(kr) = \frac{1}{2}.$$
(F.17)

Für die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten der Fluktuationskorrelationen treten die folgenden, in den Funktionen $f_{\nu,n}(K,r)$ und $g_{\nu,n}(K,r)$ zusammengefassten Arten von κ -Abhängigkeiten auf:

$$f_{\nu,n}(K,r) := \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \frac{1}{(\kappa^2 + K^2)^n} J_\nu(\kappa r) ,$$

$$g_{\nu,n}(K,r) := \int_0^\infty \frac{d\kappa}{2\pi} \frac{\kappa}{(\kappa^2 + K^2)^n} J_\nu(\kappa r) .$$
(F.18)

Mit den in Tabelle F.1 dargestellten Lösungen für das Winkelintegral und den Funktionen (F.18) lassen sich nun sämtliche Entwicklungkoeffizienten bestimmen. Die Berechnung der Funktionen (F.18) wurden mit dem Softwarepaket Maple [67] durchgeführt und die Lösungen sind in der Tabelle F.2 und F.3 aufgeführt.

$$\begin{array}{ll} f_{0,0}(K,r) &= \frac{1}{2\pi r} & \sim \frac{1}{2\pi r} \\ f_{0,1}(K,r) &= \frac{1}{4K}(I_0(Kr)) - L_0(Kr)) & & \sim \frac{1}{4K} + \mathcal{O}(r) \\ f_{0,2}(K,r) &= \frac{r}{4\pi K^2} + \frac{1}{8K^3} \Big(I_0(Kr) - L_0(Kr) \Big) \\ & & -\frac{r}{8K^2} \Big(I_1(Kr) - L_1(Kr) \Big) & \sim \frac{1}{8K^3} + \mathcal{O}(r^2) \\ f_{0,3}(K,r) &= \frac{3r}{16\pi K^4} + \frac{(3+r^2K^2)}{32K^5} \Big(I_0(Kr) - L_0(Kr) \Big) \\ & & -\frac{r}{8K^4} \Big(I_1(Kr) - L_1(Kr) \Big) & \sim \frac{3}{32K^5} + \mathcal{O}(r^2) \\ f_{1,0}(K,r) &= -\frac{1}{2\pi r} & \sim -\frac{1}{2\pi r} \\ f_{1,1}(K,r) &= -\frac{1}{4\pi K} \Big(2K_1(Kr) - K_0(Kr)I_1(Kr) \\ & & -K_1(Kr)I_0(Kr) \Big) & \sim -\frac{1}{4\pi K^2 r} + \mathcal{O}(r\ln(Kr)) \\ f_{1,2}(K,r) &= -\frac{r}{4\pi K^2} K_0(Kr) - \frac{1}{4\pi K^3} \Big(2K_1(Kr) \\ & & -K_0(Kr)I_1(Kr) - K_1(Kr)I_0(Kr) \Big) \\ &= -\frac{r}{4\pi K^2} K_0(Kr) + \frac{f_{1,1}(K,r)}{16\pi K^3} K_1(Kr) \\ & & -\frac{1}{4\pi K^5} \Big(2K_1(Kr) - K_0(Kr)I_1(Kr) \\ & & -K_1(Kr)I_0(Kr) \Big) \\ &= -\frac{r^2}{16\pi K^3} K_1(Kr) + \frac{f_{1,2}(K,r)}{K^2} & \sim -\frac{1}{4\pi K^6 r} + \mathcal{O}(r) \\ \end{array}$$

Tabelle F.2: Die Lösungen der in (F.18) definierten Funktion $f_{\nu,n}(K,r)$.

$g_{0,1}(K,r)$	$=\frac{K_0(Kr)}{2\pi}$	$\sim -\frac{\ln(Kr)}{2\pi} + \mathcal{O}(0)$
$g_{0,2}(K,r)$	$= \frac{r}{4\pi K} K_1(Kr)$	$\sim \frac{1}{4\pi K^2} + \mathcal{O}(r^2 \ln(Kr))$
$g_{0,3}(K,r)$	$= \frac{r^2}{16\pi a^2} K_0(Kr) + \frac{r}{8\pi a^3} K_1(Kr)$	$\sim \frac{1}{8\pi K^4} + \mathcal{O}(r^2)$
$g_{1,1}(K,r)$	$= \frac{1}{2\pi} - \frac{1}{4} \Big(I_1(Kr) - L_1(Kr) \Big)$	$\sim \frac{1}{2\pi} + \mathcal{O}(r)$
$g_{1,2}(K,r)$	$= \frac{r}{8a} \Big(I_0(Kr) - L_0(Kr) \Big)$	
	$-\frac{1}{8a^2}\Big(I_1(Kr) - L_1(Kr)\Big)$	$\sim \mathcal{O}(r)$
$g_{1,3}(K,r)$	$= \frac{r^2}{16\pi K^2} + \frac{r}{16K^3} \left(I_0(Kr) - L_0(Kr) \right)$	
	$-\frac{3+r^2K^2}{32K^4}\Big(I_1(Kr)-L_1(Kr)\Big)$	$\sim \mathcal{O}(r)$

Tabelle F.3: Die Lösungen der in (F.18) definierten Funktion $g_{\nu,n}(K,r)$.

Literaturverzeichnis

- KANTSLER, V. ; SEGRE, E. ; STEINBERG, V.: Dynamics of interacting vesicles and rheology of vesicle suspension in shear flow. In: *Europhys. Lett.* 82 (2008), Nr. 5, S. 58005
- [2] DANKER, D. ; MISBAH, C.: Rheology of a Dilute Suspension of Vesicles. In: Phys. Rev. A 98 (2007), Nr. 8, S. 088104
- [3] ABBOTT, J. R.; TETLOW, N.; GRAHAM, A. L.; ALTOBELLI, S. A.; FUKUSHIMA, E.; MONDY, L. A.; STEPHENS, T. S.: Experimental-Observations of particle migartion in concentrated suspensions Couette-flow. In: J. Rheol. 35 (1991), Nr. 5, S. 773
- [4] BAMMERT, J.; SCHREIBER, S.; ZIMMERMANN, W.: Dumbbell diffusion in a spatially periodic potential. In: *Phys. Rev. E* 77 (2008), Nr. 4, S. 042102
- [5] BAMMERT, J.; ZIMMERMANN, W.: Dumbbell transport and deflection in a spatially periodic potential. In: *Eur. Phys. J. E* 28 (2009), S. 331
- [6] GROISMAN, A. ; STEINBERG, V.: Elastic turbulence in a polymer solution flow. In: *Nature* 405 (2000), Nr. 6782, S. 53
- [7] GROISMAN, A. ; STEINBERG, V.: Elastic turbulence in curvilinear flows of polymer solutions. In: New J. Phys. 6 (2004), S. 29
- [8] CALFLISCH, R. E.; LIM, C.; LUKE, J. H. C.; SANGANI, A. S.: Periodic-Solutions for 3 Sedimenting Spheres. In: *Phys. Fluids* 31 (1988), Nr. 11, S. 3175
- [9] HOCKING, L. M.: The Behaviour of Clusters of Spheres Falling in a viscous Fluid 2. Slow Motion Theory. In: J. Fluid Mech. 20 (1964), Nr. 1, S. 129
- [10] LADAVAC, K.; GRIER, D. G.: Colloidal hydrodynamic coupling in concentric optical vortices. In: *Europhys. Lett.* 70 (2005), Nr. 4, S. 548
- [11] HOLZER, L. ; ZIMMERMANN, W.: Particles held by springs in a linear shear flow exhibit oscillatory motion. In: *Phys. Rev. E* 73 (2006), Nr. 6, S. 060801
- [12] CH. BRÜCKER, J. S.; SCHRÖDER, W.: Feasability study of wall shear stress imaging using microstructured surfaces with flexible micropillars. In: *Exp. Fluids* 39 (2005), Nr. 2, S. 464
- [13] BRÜCKER, C. ; BAUER, D. ; CHAVES, H.: Dynamic response of micro-pillar sensors measuring fluctuating wall-shear-stress. In: *Exp. Fluids* 42 (2007), Nr. 5, S. 737
- [14] KNIGHT, J.: Microfluidics: Honey, I shrunk the lab. In: *Nature* 418 (2002), Nr. 6897, S. 474
- [15] DIMOTAKIS, P. E.: Turbulent Mixing. In: Annu. Rev. Fluid Mech. 37 (2005), Nr. 1, S. 329

- [16] PERKINS, T. T.; SMITH, D. E.; LARSON, R.; CHU, S.: Stretching of a single tethered polymer in a uniform-flow. In: *Science* 268 (1995), Nr. 5207, S. 83
- [17] SMITH, D. E.; BABCOCK, H. P.; CHU, S.: Single-Polymer Dynamics in Steady Shear Flow. In: Science 283 (1999), Nr. 5408, S. 1724
- [18] LARSON, R. G.; PERKINS, T. T.; SMITH, D. E.; CHU, S.: Hydrodynamics of a DNA molecule in a flow field. In: *Phys. Rev. E* 55 (1997), Nr. 2, S. 1794
- [19] SCHROEDER, C. M.; TEIXEIRA, R. E.; SHAQFEH, E. S. G.; CHU, S.: Characteristic Periodic Motion of Polymers in Shear Flow. In: *Phys. Rev. A* 95 (2005), Nr. 1, S. 018301
- [20] RZEHAK, R.; KIENLE, D.; KAWAKATSU, T.; ZIMMERMANN, W.: Partial draining of a tethered polymer in flow. In: *Europhys. Lett.* 46 (1999), Nr. 6, S. 821
- [21] RZEHAK, R.; KROMEN, W.; KAWAKATSU, T.; ZIMMERMANN, W.: Deformation of a tethered polymer in uniform flow. In: *Eur. Phys. J. E* 2 (2000), Nr. 1, S. 3
- [22] RZEHAK, R.; ZIMMERMANN, W.: Dynamics of strongly deformed polymers in solution. In: *Europhys. Lett.* 59 (2002), Nr. 5, S. 779
- [23] DOYLE, P. S.; LADOUX, B.; VIOVY, J.: Dynamics of a tethered polymer in shear flow. In: *Phys. Rev. A* 84 (2000), Nr. 20, S. 4769
- [24] LADOUX, B. ; DOYLE, P. S.: Stretching tethered DNA chains in shear flow. In: Europhys. Lett. 52 (2000), Nr. 5, S. 511
- [25] GRATTON, Y.; SLATER, G. W.: Molecular dynamics study of tethered polymers in shear flow. In: *Eur. Phys. J. E* 17 (2005), Nr. 4, S. 455
- [26] KIENLE, D.; RZEHAK, R.; ZIMMERMANN, W.: Nonlinear Stokes law and hydrodynamically enhanced fluctuations of polymers in flow (Vorabdruck)
- [27] DROSSINOS, Y.; REEKS, M. W.: Brownian motion of finite-inertia particles in a simple shear flow. In: *Phys. Rev. E* 71 (2005), Nr. 3, S. 031113
- [28] RODRÍGUEZ, R. F. ; SALINAS-RODRÍGUEZ, E. ; DUFTY, J. W.: Fokker-Planck and Langevin descriptions of fluctuations in uniform shear flow. In: J. Stat. Phys. 32 (1983), Nr. 2, S. 279
- [29] SUBRAMANIAN, G.; BRADY, J. F.: Multiple scales analysis of the Fokker-Planck equation for simple shear flow. In: *Physica A* 334 (2004), Nr. 3, S. 343
- [30] SHEA, J. E.; OPPENHEIM, I.: Fokker-Planck and non-linear hydrodynamic equations of an inelastic system of several Brownian particles in a non-equilibrium bath. In: *Physica A* 250 (1998), Nr. 1-4, S. 265
- [31] HERNÁNDEZ, S. I.; SANTAMARÍA-HOLEK, I.; MENDOZA, C. I.; CASTILLO, L. F.: Generalized hydrodynamics of a dilute suspension of finite-sized particles: Dynamic viscosity. In: *Phys. Rev. E* 74 (2006), Nr. 5, S. 051401
- [32] SANTAMARÍA-HOLEK, I.; RUBÍ, J. M.; PÉREZ-MADRID, A.: Mesoscopic thermodynamics of stationary non-equilibrium states. In: New J. Phys. 7 (2005), S. 35
- [33] MIYAZAKI, K. ; BEDEAUX, D.: Brownian motion in a fluid in simple shear flow. In: *Physica A* 217 (1995), Nr. 1-2, S. 53

- [34] BEDEAUX, D. ; MAZUR, P.: Brownian motion and fluctuating hydrodynamics. In: *Physica* 76 (1974), Nr. 2, S. 247
- [35] BAMMERT, J.; HOLZER, L.; ZIMMERMANN, W.: Shear induced correlations between the Brownian motion of two trapped particles (*Vorabdruck*). 2009
- [36] BAMMERT, J.; HOLZER, L.; ZIMMERMANN, W.: Dynamics of a trapped brownian particle in Poiseuille flow (Vorabdruck). 2009
- [37] HOLZER, L.: Effekte von hydrodynamischer Wechselwirkung und Fluktuationen auf Teilchen in Strömungen, Universität des Saarlandes, Diplomarbeit, 2003
- [38] ZIEHL, A. ; BAMMERT, J. ; HOLZER, L. ; WAGNER, C. ; ZIMMERMANN, W.: Direct measurement of shear induced correlations of Brownian motion perpendicular and along the streamlines (*Vorabdruck*). 2009
- [39] KHUJADZE, G.; OBERLACK, M.; CHAGELISHVILI, G.: Direct numerical simulation of stochastically forced laminar plane Couette flow: Peculiarities of hydrodynamic fluctuations. In: *Phys. Rev. A* 97 (2006), Nr. 3, S. 034501
- [40] ZARATE, J. M. O.; SENGERS, J. V.: Transverse-velocity fluctuations in a liquid under steady shear. In: *Phys. Rev. E* 77 (2008), Nr. 2, S. 026306
- [41] BAMIEH, B.; DAHLEH, M.: Energy amplification in channel flows with stochastic excitation. In: *Phys. Fluids* 13 (2001), Nr. 11, S. 3258
- [42] GROSSMANN, S.: The onset of shear flow turbulence. In: Rev. Mod. Phys. 72 (2000), Nr. 2, S. 603
- [43] ECKHARDT, B.; PANDIT, R.: Noise correlations in shear flows. In: Eur. Phys. J. B 33 (2003), Nr. 3, S. 373
- [44] ROTNE, J.; PRAGER, S.: Variational Treatment of Hydrodynamic Interaction in Polymers. In: J. Chem. Phys. 50 (1969), Nr. 11, S. 4831
- [45] REICHERT, M. ; STARK, H.: Synchronization of rotating helices by hydrodynamic interactions. In: Eur. Phys. J. E 17 (2005), Nr. 4, S. 493
- [46] VILFAN, A. ; JÜLICHER, F.: Hydrodynamic flow patterns and synchronization of beating cilia. In: *Phys. Rev. A* 96 (2006), Nr. 5, S. 058102
- [47] RZEHAK, R.; ZIMMERMANN, W.: Static dynamics approach to relaxation modes and times for deformed polymers. In: *Phys. Rev. E* 68 (2003), Nr. 2, S. 021804
- [48] DELGADO-BUSCALIONI, R.: Cyclic motion of a grafted polymer under shear flow. In: *Phys. Rev. A* 96 (2006), Nr. 8, S. 088303
- [49] DHONT, J. K. G.: An introduction to dynamics of colloids. Elsevier Science Ltd, 1996
- [50] NUMERICAL ALGORITHMS GROUP: NAG Fortran Library
- [51] REIF, F.: Statistische Physik und Theorie der Wärme. 3. de Gruyter, 1987
- [52] FAXÉN, H.: In: Arkiv. Mat. Astron. Fys. Bd.18 (1923)
- [53] LANDAU, L. D.; LIFSCHITZ, E. M.: *Hydrodynamik, IV.* Verlag Harri Deutsch, 1978 (Lehrbuch der Theoretischen Physik)

- [54] LANDAU, L. D.; LIFSCHITZ, E. M.: Statistische Physik, Teil 2, IX. Verlag Harri Deutsch, 1978 (Lehrbuch der Theoretischen Physik)
- [55] CHAIKIN, P. M.; LUBENSKY, T. C.: Principles of Condensed Matter Physics. Cambridge University Press, 1995
- [56] LANDAU, L. D.; LIFSCHITZ, E. M.: Statistische Physik, Teil 1, IV. Verlag Harri Deutsch, 1978 (Lehrbuch der Theoretischen Physik)
- [57] MAZUR, P. ; BEDEAUX, D.: A generalization of Faxen's theorem to nonsteady motion of a sphere through an incompressible fluid in arbitrary flow. In: *Physica* 76 (1974), Nr. 2, S. 235
- [58] REICHL, L. E.: A Modern Course in Statistical Physics. 2. WILEY-VCH, 1998
- [59] FORSTER, D.: Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry, and correlation functions. Reading, USA : W. A. Benjamin Inc., 1975 (Frontiers in Physics, Nr. 47)
- [60] GROOT, S. R.; MAZUR, P.: Non-Equilibrium Thermodynamics. Dover, 1984
- [61] MAZENKO, G. F.: Nonequilibrium statistical mechanics. Weinheim : WILEY-VCH, 2006
- [62] KUBO, R.; TODA, M.; HASHITSUME, N.: Statistical Physics II, Nonequilibrium Statistical Mechanics. Berlin: Springer-Verlag, 1978
- [63] CHANDRASEKHAR, S.: Hydrodynamic and hydromagnetic stability. International Series of Monographs on Physics, Oxford: Clarendon, 1961, 1961
- [64] Die numerischen Berechnungen wurden in großen Teilen mit der Skriptsprache Python 2.5 zusammen mit der Bibliothek NumPy (http://numpy.scipy.org/) durchgeführt. Zur Darstellung der Ergebnisse wurde die Python-Erweiterung Matplotlib (http://matplotlib.sourceforge.net) benutzt.
- [65] Hierzu hat mir freundlicherweise Georg Freund ein kleines Python Skript zur Berechnung der Basisfunktionen zur Verfügung gestellt.
- [66] ABRAMOWITZ, M. (Hrsg.); STEGUN, I. A. (Hrsg.): Handbook of mathematical functions. New York : Dover Publications, 1964
- [67] MAPLESOFT, a division of Waterloo Maple I.: Maple 11. 2007
- [68] ONSAGER, L.: Reciprocal relations in irreversible processes. I/II. In: Phys. Rev. 37/38 (1931), S. 405/2265
- [69] BOAS, M. L. (Hrsg.): Mathematical methods in the physical science. Wiley, 2006

Danksagung

Ich möchte den folgenden Personen danken, da sie zur Fertigstellung der Doktorarbeit einen großen Beitrag geleistet haben.

Zunächst möchte ich Walter Zimmermann für die Betreuung der Arbeit danken. Weiterhin danke ich allen Arbeitsgruppenmitgliedern aus Saarbrücken und Bayreuth für das gute Klima und fürs Zuhören. Herausheben möchte ich hierbei Markus Hilt, Ronny Peter, Georg Freund und Luigi mit denen ich zeitweise das Büro geteilt habe.

Sehr großen Dank schulde ich Falko Ziebert und Jochen Bammert für intensives Korrekturlesen und fruchtbare Diskussionen auch bei Bier und Whiskey.

Meinen Eltern und Geschwistern möchte ich für die seelische und moralische Unterstützung danken und Fanto fürs Zuhören und die Treue (Leider passte meine Dissertation nicht mehr in dein Hundeleben).

Den meisten Dank schulde ich meiner Frau Susanne und meiner Tochter Ronja, die das (nicht enden wollende) Abenteuer Bayreuth mitgemacht haben, und die besonders im letzten Promotionsjahr mehr von mir verdient gehabt hätten. Ich danke euch, dass ich trotz der schwierigen Umstände die Möglichkeit hatte, die Arbeit zu Ende zu bringen.

Ich erkläre hiermit an Eides Statt, dass ich diese Arbeit selbst angefertigt und nur die in der Arbeit angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Bayreuth, den

Lukas Holzer