

Karsten Kötter

Instabilität durch doppelt–diffusive
Konvektion: Strukturbildung in
Experiment und Simulation

Dissertation
zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
des Fachbereichs Physik der Universität Dortmund

Referent: Prof. Dr. Mario Markus
Max-Planck-Institut für molekulare Physiologie, Dortmund

Koreferent: Prof. Dr. Joachim Stolze
Lehrstuhl für Theoretische Physik I, Universität Dortmund

Dortmund, Dezember 2001

Inhaltsverzeichnis

Überblick	1
1 Einleitung	3
1.1 Strukturbildung in Flüssigkeiten	3
1.2 Grundlagen der doppelt-diffusiven Konvektion	3
1.3 Auftreten der doppelt-diffusiven Konvektion	5
1.4 Abgrenzung und Zielsetzung dieser Arbeit	6
2 Grundlagen	9
2.1 Theoretische Grundlagen	9
2.2 Simulationsmethoden	14
2.2.1 Simulationsmodell	15
2.2.2 Rand- und Anfangsbedingungen	16
2.2.3 Zweidimensionale Simulationen	17
2.2.4 Dreidimensionale Simulationen	19
2.3 Experimentelle Grundlagen	22
2.3.1 Tensid/Glyzerin System	22
2.3.2 Glycerid/Glucose System	24
2.4 Aufbau und Durchführung der Experimente	24
2.5 Auswertungsmethoden	27
3 Wellenlänge der Strukturen	31
3.1 Theoretische Überlegungen	31

3.1.1	Stufenförmige Anfangsbedingung	33
3.1.2	Nicht-stufenförmige Anfangsbedingung	37
3.2	Wellenlängen in der Simulation	39
3.2.1	Stufenförmige Anfangsbedingung	39
3.2.1.1	Anfängliches Rauschen	40
3.2.1.2	Höhenabhängigkeit	42
3.2.1.3	Zeitliche Entwicklung	43
3.2.1.4	Konzentrationsabhängigkeit	50
3.2.1.5	Variation des Stabilitätsverhältnis	54
3.2.2	Lineare Anfangsbedingung	56
3.2.2.1	Zeitliche Entwicklung	57
3.2.2.2	Konzentrationsabhängigkeit	58
3.2.2.3	Variation des Stabilitätsverhältnis	60
3.2.3	Verhalten bei konstanter Zeit	61
3.3	Experimentelle Bestimmung der Wellenlängen	64
3.3.1	Tensid/Glyzerin System	64
3.3.1.1	Zeitliche Entwicklung	65
3.3.1.2	Konzentrationsabhängigkeit	67
3.3.1.3	Variation des Stabilitätsverhältnis	69
3.3.2	Glycerid/Glucose System	70
3.3.3	Vergleich von Simulationen und Experimenten	72
3.4	Simulationen mit Injektion	73
3.5	Abschließender Vergleich	79
4	Form der Strukturen	81
4.1	Simulationen mit Strömungen	81

4.1.1	Externe Scherströmung	81
4.1.2	Quasi-eindimensionale selbstgenerierte Scherströmung	86
4.1.3	Quasi-zweidimensionale selbstgenerierte Scherströmung	92
4.1.4	Entstehung neuer Strukturen	94
4.2	Experimente mit Strömungen	97
4.2.1	Externe Scherströmung	97
4.2.2	Selbstgenerierte Scherströmung	99
	Zusammenfassung	103
	Danksagung	105
	Literaturverzeichnis	107

Überblick

In der vorliegenden Arbeit wird die Strukturbildung durch doppelt-diffusive Konvektion untersucht. Dies geschieht mit Computersimulationen, Experimenten und theoretischen Überlegungen.

Nach einem Überblick über verschiedene doppelt-diffusive Systeme werden die hier durchgeführten Untersuchungen in diesen Kontext eingegliedert. Anschließend werden die Grundlagen der theoretischen Beschreibung, das für die Computersimulationen verwendete Modell und die experimentelle Umsetzung vorgestellt.

Mit diesen Methoden werden die eigentlichen Untersuchungen dieser Arbeit in den folgenden Kapiteln durchgeführt. Diese Untersuchungen gliedern sich in die zwei Teile: einen über die Wellenlänge und einen Teil über die Form der Strukturen.

Zur Beschreibung der Wellenlänge der durch die doppelt-diffusive Konvektion gebildeten Strukturen werden bestehende theoretische Beschreibungen erweitert. Die daraus folgenden Ergebnisse werden anschließend mit Computersimulationen und Experimenten verglichen.

Der zweite Untersuchungspunkt dieser Arbeit wird die Form der Strukturen sein. Hierbei wird eine Variation der Geometrie zu neuartigen Strukturen führen. Diese werden mit Computersimulationen und Experimenten untersucht.

1 – Einleitung

1.1 Strukturbildung in Flüssigkeiten

In Flüssigkeiten können unterschiedliche Formen der Strukturbildung auftreten. Die wohl bekanntesten strukturbildenden Systeme in Flüssigkeiten sind das Rayleigh-Bénard und das Taylor-Couette System. Einen Überblick über diese Systeme ist in [7] zu finden. Bei diesen Systemen entsteht die strukturbildende Instabilität durch eine Komponente des Systems. Im Gegensatz dazu handelt es sich bei der doppelt-diffusiven Finger Instabilität um ein System, bei dem zwei Komponenten notwendig sind. Diese Strukturbildung ist der Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit und wird im Folgenden erklärt.

1.2 Grundlagen der doppelt-diffusiven Konvektion

Die minimalen Anforderungen für das Auftreten von doppelt-diffusiver Konvektion sind die folgenden:

- Die Flüssigkeit muß zwei Komponenten mit unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten besitzen.
- Die Komponenten müssen entgegengesetzte Beiträge zum vertikalen Dichtegradienten liefern.

Es wird angenommen, daß die Substanzen vollständig mischbar sind, so daß durch Oberflächenspannung bedingte Effekte keine Rolle spielen. Das ursprüngliche Beispiel für ein doppelt-diffusives System ist Wasser, welches einen vertikalen Gradienten der Temperatur (T) und des Salzgehalts (S) besitzt. Temperatur und Salz besitzen unterschiedliche Diffusionskoeffizienten ($D_T/D_S \approx 30$), somit sind beide angeführten Bedingungen erfüllt. In Abhängigkeit von der räumlichen Verteilung dieser beiden Substanzen können, wie im allgemeinen bei der doppelt-diffusiven Konvektion, zwei Instabilitäten unterschieden werden: die oszillatorische Instabilität und die Finger-Instabilität.

Zur Veranschaulichung des ersten Falls wird eine räumliche Anordnung betrachtet, bei der sich eine kältere und salzärmere Wasserschicht über einer wärmeren und salzhaltigeren Schicht

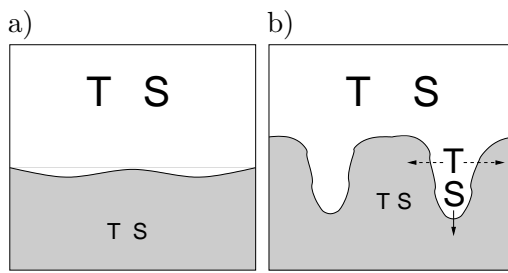


Abbildung 1.2.1: a) und b) Schematische Darstellung der doppelt-diffusiven Finger-Instabilität. Die obere Schicht (hell) hat einen höheren Salzgehalt (S) und eine höhere Temperatur (T) (kenntlich gemacht durch die Schriftgröße) als die untere (dunkler). a) Anfängliche Verteilung mit Fluktuationen an der Grenzschicht. b) Schnellere Diffusion von T (\dashrightarrow) führt zu einem lokalen Übergewicht an S ; dadurch wächst der Finger (\downarrow).

befindet. Der dichtesenkende Beitrag der höheren Temperatur der unteren Schicht dominiert, so daß die gesamte Anordnung instabil verteilt sei. Ein kleines Volumenelement, das aufgrund der instabilen Dichteverteilung von der unteren Schicht aufsteigt, wird während des Aufstiegs seine höhere Temperatur durch Diffusion verlieren. Die Diffusion des Salzes ist hingegen zunächst zu vernachlässigen ($D_T \gg D_S$). Damit entfällt der Auftrieb durch die höhere Temperatur, und somit sinkt das Volumenelement wieder nach unten. Dies kann zu Oszillationen führen.

Die Finger-Instabilität entsteht bei einer Verteilung, bei der sich eine wärmere und salzhaltigere Wasserschicht über einer kälteren und salzärmeren Schicht befindet. Der dichtesenkende Beitrag der höheren Temperatur der oberen Schicht dominiert, so daß die obere Schicht insgesamt leichter als die darunter liegende sei. Unter Vernachlässigung der einzelnen Komponenten würde eine zufällige Fluktuation der Grenzschicht bei einer derartigen Dichteverteilung wieder verschwinden. Im Konsens der Wissenschaftler wird dies im Folgenden als 'gravitationsbedingt stabil' bezeichnet. Unter Berücksichtigung des Verhaltens der einzelnen Komponenten ändert sich dies jedoch, da sich die höhere Temperatur einer Fluktuation der oberen in die untere Schicht (siehe Abb. 1.2.1.a)) aufgrund der Temperaturunterschiede und der Diffusionskoeffizienten ($D_T > D_S$) durch Diffusion verringert. Somit dominiert lokal der dichteerhöhende Effekt der höheren Salzkonzentration, demzufolge sinkt diese Stelle. Dies führt über die dadurch induzierte Strömung zu einem selbstverstärkenden Prozeß: ein Salzfinger wächst (siehe Abb. 1.2.1.b)). In dem Bereich seitlich des Fingers führt die lokal niedrigere Salzkonzentration zu einem Aufstieg dieser Stelle. Diese entgegengerichteten vertikalen Strömungen bilden eine Konvektionsrolle aus. Diese induziert in der Umgebung die weitere Bildung von Fingern, dadurch entsteht eine regelmäßige Struktur. Die Finger entstehen also spontan durch zufällige Fluktuation oder durch vertikale Strömungen induziert in der Nachbarschaft von existierenden Fingern. Die Wellenlänge und Anordnung dieser Strukturen wird im späteren Kapiteln beschrieben.

Bemerkenswert an dieser Strukturbildung ist die Tatsache, daß sie aus einer insgesamt räumlich stabilen Gesamtverteilung entsteht. Die Energie für diesen Prozeß stammt hierbei aus der potentiellen Energie der (für sich alleine betrachtet) räumlich instabilen Verteilung des Salzes.

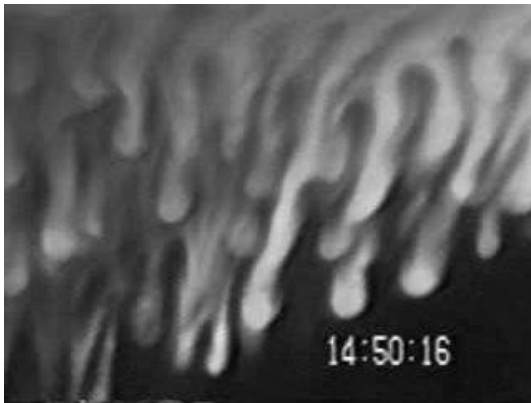


Abbildung 1.3.1: Experimentelle Realisation der Anordnung aus Abb. 1.2.1 im Labor. Die Salzfinger (hell) wurden durch die Zugabe von Fluorescein sichtbar gemacht (aus [11])

Dieser Prozeß wurde erstmalig 1956 beschrieben [51] und als eine ‘oceanographische Kuriosität’ bezeichnet. Es hat sich jedoch herausgestellt, daß das Phänomen der doppelt-diffusiven Finger Instabilität in den verschiedensten Systemen auftritt. Einige dieser Systeme werden im folgenden Kapitel kurz vorgestellt.

1.3 Auftreten der doppelt-diffusiven Konvektion

Das typische Beispiel für doppelt-diffusive Konvektion ist Wasser mit einer Salz- und Temperaturverteilung wie oben angeführt. Ein Bild der doppelt-diffusiven Finger aus einem Laborexperiment mit dieser Konfiguration ist in Abb. 1.3.1 dargestellt. Im Ozean wurde dies westlich von Gibraltar [60] und in der Karibik [39] beobachtet. In der Karibik entsteht diese Verteilung durch die Erwärmung der oberen Wasserschichten durch Sonneneinstrahlung; die höhere Salzkonzentration entsteht aufgrund von Verdunstung des Wasser an der Oberfläche. Westlich von Gibraltar entsteht die räumlich Verteilung, indem das wärmere und salzhaltigere Mittelmeerwasser durch die Straße von Gibraltar strömt und sich über das kältere und salzärmere Atlantikwasser schichtet. Desweiteren ist doppelt-diffusive Konvektion in der Umgebung von Eisbergen zu beobachten. Dies ist insbesondere für die technische Nutzung von Eisbergen als Frischwasserquelle für trockene Regionen relevant [14, 1].

Doppelt-diffusive Konvektion ist aber nicht auf das Salz/Temperatur System beschränkt, sondern tritt vielmehr in vielfältiger Art und Weise in der Natur und Technik auf. Das Auftreten von doppelt-diffusiver Konvektion im Erdmantel wurde anhand der in Magma erstarrten Strukturen nachgewiesen [57]. Auf einer größeren Skala sagen theoretische Modelle doppelt-diffusive Konvektion in Sternen voraus. Im einfachsten Fall geschieht dies in Form von “Helium Fingern” aufgrund von Temperatur- und Wasserstoffkonzentrationsgradienten [56], die den klassischen Salz fingern entsprechen. Darüber hinaus sind Modelle vorgeschlagen worden, die magnetische Felder und/ oder Drehimpuls berücksichtigen. Dies würde zu sogenannten “Drehimpuls Fingern” führen [57].

Ein ökologisches Interesse an doppelt-diffusiver Konvektion ist dadurch gegeben, das diese bei Schadstoffeinleitungen ins Meer auftreten kann. Somit können entsorgt geglaubte Schadstoffe durch Fingerbildung aufsteigen [16]. Doppelt-diffusive Fingerbildung kann in den Schmelzen von Metallegierungen auftreten, so daß nach der Kristallisation inhomogene Konzentrationen in der Legierung vorliegen [57]. Dieses Problem kann ebenso beim Wachstum von Halbleiterkristallen auftreten [6]. Doppelt-diffusive Konvektion kann beim Nachfüllen von Erdgastanks entstehen und einen raschen Druckanstieg zur Folge haben [16].

Anhand dieser Beispiele aus den unterschiedlichsten Bereichen kann man die Relevanz der doppelt-diffusiven Konvektion erkennen. Übersichtsartikel zu diesem Themengebiet sind beispielsweise [6, 16, 56, 57, 39].

1.4 Abgrenzung und Zielsetzung dieser Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit werden Experimente mit einem doppelt-diffusiven System durchgeführt. In bisherigen Untersuchungen wurden hierfür primär das Salz/Temperatur System oder das Salz/Zucker System verwendet. In beiden System wird Wasser als Umgebungsflüssigkeit verwendet. Das Salz/Temperatur System wurde im Einleitungskapitel erläutert (Seite 3), Untersuchungen mit diesem System finden sich beispielsweise in [55, 40, 20]. Das Salz/Zucker System beinhaltet zwei dichteerhöhende Substanzen und wird deswegen kurz erläutert. Salz und Zucker besitzen unterschiedliche Diffusionskoeffizienten ($D_{\text{Salz}} > D_{\text{Zucker}}$). Zucker als die langsamer diffundierende Substanz ist demzufolge räumlich destabilisierend angeordnet (Substanz S) und übernimmt damit die Rolle des Salz im Salz/Temperatur System. Somit befindet sich eine Schicht höherer Zuckerkonzentration oberhalb einer Schicht mit einer niedrigeren Zuckerkonzentration. Das Salz übernimmt die Rolle der räumlich stabilisierenden Substanz (Substanz T), somit befindet sich eine Schicht niedrigerer Salzkonzentration oberhalb einer Schicht mit höherer Konzentration. Um eine ‘gravitationsbedingt stabil’ verteilte Gesamtkonfiguration zu erhalten, ist der Beitrag des Dichtegradienten des Salzes größer als der des Zuckers. Die doppelt-diffusiven Strukturen bestehen aus Regionen unterschiedlicher Zuckerkonzentrationen. Experimente an diesem System finden sich beispielsweise in [54, 47, 15, 48, 21, 53].

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein System bestehend aus einem gelösten Tensid und Glycerin in Wasser verwendet. In einem geeigneten Konzentrationsbereich aggregiert das Tensid zu Mizellen und hat einen geringen Diffusionskoeffizienten als Glycerin. Demzufolge ist Glycerin die räumlich stabilisierende Substanz (T). Aufgrund der gegenüber Wasser höheren Dichte befindet sich eine Schicht mit niedrigerer Glycerinkonzentration oberhalb einer Schicht mit einer höheren. Das verwendete Tensid besitzt eine geringere Dichte als Wasser. Aufgrund der destabilisierenden räumlichen Verteilung (Substanz S) befindet sich also eine Schicht niedrigerer

Tensidkonzentration oberhalb einer Schicht mit einer höheren Konzentration. Aufgrund der ‘gravitationsbedingt stabilen’ Gesamtverteilung ist der Dichtegradient des Glycerins größer als der des Tensids. Die doppelt-diffusiven Strukturen bestehen aus Regionen unterschiedlicher Tensidkonzentrationen.

Der Mechanismus der doppelt-diffusiven Konvektion ist in diesen Systemen gleich. Experimentell zeigen diese Systeme jedoch unterschiedliche Vor- und Nachteile. Die beiden ‘klassischen’ Systeme Salz/Temperatur und Zucker/Salz haben den Nachteil, daß Konzentrationsunterschiede ad hoc nicht sichtbar sind. Die Beobachtung der doppelt-diffusiven Strukturen geschieht durch Zugabe eines Kontrastmittels [54], durch Einführen von Meßsonden [40, 55, 20] oder durch Ausnutzung der Veränderung des Brechungsindex von Wasser bei Konzentrationsunterschieden [47, 15, 48, 21, 53]. Diese Vorgehensweisen sind jedoch nicht unproblematisch. Die Visualisierung der Strukturen unter Ausnutzung des Brechungsindex hat den Nachteil, daß hinreichende Konzentrationsunterschiede vorliegen müssen um sie über ihren Einfluß auf den Brechungsindex sichtbar machen zu können. Die Einführung von Meßsonden hat den Nachteil, daß durch den Eingriff von außen das System gestört wird. Die Hinzugabe von Kontrastmitteln ist problematisch, da das System nun prinzipiell aus drei gelösten Substanzen besteht und somit streng genommen keine doppelt-diffusive Konvektion vorliegt. Der Einfluß einer dritten Substanz wurde in [10] untersucht. Es stellte sich heraus, daß schon eine geringe Konzentration einer dritten Substanz mit einem Diffusionskoeffizienten vergleichbar dem der langsamer diffundierenden Substanz einen deutlichen Einfluß auf das Verhalten des Systems hat. Desweiteren muß sichergestellt sein, daß die lokalen Konzentrationen des Kontrastmittels mit der der destabilisierenden Substanz korreliert sind; so wäre beispielsweise eine Substanz mit einem Diffusionskoeffizienten vergleichbar mit dem der schneller diffundierenden Substanz unbrauchbar.

Diese Probleme treten in den hier verwendeten Systemen nicht auf, da das Tensid selbst eine Trübung in wässriger Lösung verursacht. Somit sind durch diese Trübung die doppelt-diffusiven Strukturen sichtbar. Dies gewährleistet eine einfache und direkte Beobachtung sowie eine einfache Handhabung. Desweiteren besitzen die verwendeten Substanzen stark unterschiedliche Diffusionskoeffizienten (siehe Kap. 2.3.1, Seite 22). Dies führt aufgrund der Bedingung für das Auftreten der doppelt-diffusiven Finger-Instabilität (siehe Kap. 2.1, Gl. 2.1.14, Seite 12) zu einem großen Variationsbereich der Konzentrationen.

Bisherige Arbeiten auf dem Gebiet der doppelt-diffusiven Konvektion konzentrierten sich primär auf die Untersuchung der Flüsse der Substanzen T und S . Experimentelle Untersuchungen zu diesem Thema finden sich beispielsweise in [47, 23, 20], theoretischen Arbeiten in [28, 23] und Simulationen in [43, 35, 36]. Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten lag bei Untersuchungen der Stabilität [50, 13, 12]. Zur Wellenlänge wurden bisher nur wenige Untersuchungen durchgeführt [20], ebenso wie zur Form der Strukturen [22].

Aufgrund der geringen Anzahl an Arbeiten über die Wellenlänge und Form der Strukturen wird als der Hauptpunkt dieser Arbeit die Geometrie der Strukturen untersucht. Dazu bietet sich das hier verwendete System aufgrund der direkten Sichtbarkeit der Strukturen und der großen Variationsmöglichkeit der Konzentrationen an. Es werden sowohl Untersuchungen zur Wellenlänge der Strukturen als auch zu deren Form durchgeführt.

Die Wellenlänge der Strukturen wurde bislang nur in [20] experimentell untersucht. Eine theoretische Beschreibung der Wellenlängen der doppelt-diffusiven Konvektion wurde von erstmalig in [49] durchgeführt und in [41] erweitert. Diese Beschreibungen geben eine Formel für die Wellenlänge in Abhängigkeit von den Konzentrationsgradienten. Diese sind experimentell jedoch nicht unproblematisch zu bestimmen, da hierbei die gleichen Probleme wie bei den oben angeführten Problemen der Visualisierung auftreten. Aus diesem Grunde werden hier die existierenden theoretischen Beschreibungen erweitert, indem durch die Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit die Wellenlänge durch die anfänglichen Konzentrationen ausgedrückt wird. Zur detaillierten Überprüfung der theoretischen Ergebnisse werden Computersimulationen durchgeführt; dies wird anschließend mit experimentellen Messungen verglichen.

Die Form der Strukturen, insbesondere unter dem Einfluß von externen Strömungen, wurde bislang nur in [21] untersucht. Dies wird als Ausgangspunkt für den zweiten Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit verwendet. Darauf aufbauend wird ein System untersucht, welches aufgrund seiner Geometrie autonom quasi-zweidimensionale Strukturen erzeugt. Diese Untersuchungen werden mit Computersimulationen und Experimenten durchgeführt.

2 – Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zum Verständnis dieser Arbeit notwendigen Grundlagen dargestellt. Da im Rahmen dieser Arbeit sowohl theoretische Überlegungen als auch Computersimulationen und Experimenten verwendet werden, sollen nun die Grundlagen dieser drei Gebiete in möglichst übersichtlicher Form vorgestellt werden.

2.1 Theoretische Grundlagen

Da es sich bei der doppelt-diffusiven Konvektion um ein hydrodynamisches Phänomen handelt, basiert die theoretische Beschreibung auf den Navier-Stokes Gleichungen der klassischen Kontinuumsmechanik. Obwohl diese Gleichungen schon seit dem 19.ten Jahrhundert bekannt sind, existieren auf diesem Gebiet viele, noch nicht vollständig verstandene Probleme. Als nur ein Beispiel sei die Turbulenz erwähnt, bei der sich aufgrund der Nichtlinearität der Gleichungen anfänglich kleine Störungen verstärken. Hierzu paßt das Zitat von Horace Lamb aus dem Jahre 1932: “Wenn ich einmal in den Himmel kommen sollte, erhoffe ich mir Aufklärung über zwei Dinge: Quantenelektrodynamik und Turbulenz. Was den ersten Wunsch betrifft, bin ich ziemlich zuversichtlich.” (aus [58], Kap. 3.3.10).

Trotz dieser Schwierigkeiten gibt es dennoch viele Beispiele, bei denen hydrodynamische Systeme durch geeignete Näherungen und Vereinfachungen theoretisch beschrieben werden können. Als bekannte Beispiele aus dem Bereich der Strukturbildung seien das Rayleigh-Bénard und das Taylor-Couette System genannt. In diesem Kapitel wird nun eine entsprechende theoretische Beschreibung der doppelt-diffusiven Finger-Instabilität durchgeführt. Hierbei werden die Ergebnisse verschiedener Arbeiten in einer kompakten Darstellung unter Verwendung einer einheitlichen Nomenklatur dargestellt. Technische Details der Rechnungen können dann den jeweiligen Arbeiten entnommen werden.

Aufgrund der großen Relevanz der klassischen Kontinuumsmechanik gibt es eine Vielzahl von Literatur über dieses Themengebiet. Eine sehr detaillierte Darstellung findet sich beispielsweise in [19].

Das Strömungsfeld einer inkompressiblen, zähen Flüssigkeit wird durch die Navier-Stokes Gleichung beschrieben:

$$\partial_t \vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = \frac{\rho}{\rho_0} \vec{g} - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta \vec{v} \quad (2.1.1)$$

Der Term $\nu \Delta \vec{v}$ beschreibt die innere Reibung mit der kinematischen Viskosität ν einer zähen Flüssigkeit. Die Auftriebskraft wirkt aufgrund der Gravitation $\vec{g} = (0, 0, -g)$ über den Term

$\frac{\rho}{\rho_0}\vec{g}$, hierbei ist ρ die lokale Dichte und ρ_0 die Referenzdichte. Die anderen drei Terme, die für sich betrachtet die Eulergleichung (siehe z.B. [19], §2) ergeben, beinhalten die Massen- und Impulserhaltung. Hierbei und im Folgenden wird die symbolische Schreibweise $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_z \equiv \frac{\partial}{\partial z}$ benutzt. Desweiteren gilt die Kontinuitätsgleichung:

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla}(\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1.2)$$

Im Folgenden wird mit der Boussinesq-Oberbeck-Approximation gearbeitet (siehe z. B. [19] §56 und [2], Kap. 7.2). Diese beruht auf der Idee, daß die durch kleine Konzentrationsänderungen hervorgerufenen Dichteänderungen ebenfalls gering sind. Deshalb wird die Dichte überall als konstant angesehen, nur nicht in dem Auftriebsterm $\frac{\rho}{\rho_0}\vec{g}$. Damit vereinfacht sich die Kontinuitätsgleichung zu

$$\vec{\nabla} \vec{v} = 0 \quad (2.1.3)$$

Die Diffusionsgleichungen zweier gelöster Substanzen S und T lauten

$$\begin{aligned} \partial_t S + (\vec{v} \vec{\nabla}) S &= D_S \Delta S \\ \partial_t T + (\vec{v} \vec{\nabla}) T &= D_T \Delta T \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

mit den entsprechenden Diffusionskonstanten D_S und D_T . Hier gilt $D_T > D_S$. Bei diesen Gleichungen wurde die wechselseitige Beeinflussung der Diffusion durch die jeweils andere Substanz vernachlässigt. Die Berücksichtigung dieser Wechselwirkung auf die doppelt-diffusive Konvektion wurden in [29, 27]) durchgeführt. Es zeigte sich, daß auch eine stabile Anordnung beider Substanzen zu Fingerbildung führen kann. Im Rahmen dieser Arbeit wird diese Wechselwirkung nicht berücksichtigt.

Die Dichte werde durch folgende lineare Gleichung beschrieben:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 + \frac{\rho_T - \rho_0}{\rho_0} T + \frac{\rho_S - \rho_0}{\rho_0} S = 1 + \alpha_T T + \alpha_S S \quad (2.1.5)$$

mit ρ_T , ρ_S als absolute und α_T , α_S als relative Dichten der gelösten Substanzen T und S . Bei den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Substanzen gilt $\alpha_T > 0$, $\alpha_S < 0$.

Diese Gleichungen werden als Ausgangspunkt der theoretischen Beschreibung der doppelt-diffusiven Konvektion benutzt.

Durch die Bildung der Rotation auf beiden Seiten von (2.1.1) wird der Druck p eliminiert:

$$\partial_t \vec{\nabla} \times \vec{v} + \vec{\nabla} \times [(\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v}] = \vec{\nabla} \times \frac{\rho}{\rho_0} \vec{g} + \nu \Delta (\vec{\nabla} \times \vec{v}) \quad (2.1.6)$$

Durch Bildung der Rotation von Gl. (2.1.6) und unter Berücksichtigung von $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{v} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) - \Delta \vec{v} = -\Delta \vec{v}$ (wegen Gl. 2.1.3) ergibt sich:

$$-\partial_t \Delta \vec{v} + \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times [(\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v}] = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \frac{\rho}{\rho_0} \vec{g} - \nu \Delta^2 \vec{v} \quad (2.1.7)$$

Es wird nun untersucht, inwieweit eine ruhende Flüssigkeit, d. h. $\vec{v} = \vec{0}$, stabil gegenüber infinitesimalen Störungen der vertikalen Geschwindigkeitskomponente $\delta\vec{v} = (0, 0, w)$ ist. Unter Vernachlässigung von Gliedern höherer Ordnung der Störung w vereinfacht sich die vertikale Komponente von Gl. (2.1.7) zu:

$$-\partial_t \Delta w = g \Delta_{xy} \frac{\rho}{\rho_0} - \nu \Delta^2 w \quad (2.1.8)$$

mit dem horizontalen Laplaceoperator $\Delta_{xy} \equiv \partial_x^2 + \partial_y^2$.

Die Verteilung der Konzentrationen von T und S werde anfänglich nur durch einen vertikalen, konstanten Konzentrationsgradienten $T_z \equiv \partial_z T$ und $S_z \equiv \partial_z S$ beschrieben.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Anordnungen gilt grundsätzlich $T_z < 0$, $S_z < 0$. Aufgrund der relativen Dichten der Substanzen ergibt sich so der stabilisierende Dichtegradient $\alpha_T T_z < 0$ und der destabilisierende $\alpha_S S_z > 0$. Eine ‘gravitationsbedingt stabile’ Anordnung liegt vor, wenn der stabilisierende Gradient dominiert, d.h. $\alpha_T T_z + \alpha_S S_z < 0$. Die Entwicklung von infinitesimalen Störungen dieser anfänglichen Verteilung werden, unter Vernachlässigung von Gliedern höherer Ordnung, durch Linearisierung von Gl. (2.1.4) beschrieben:

$$\begin{aligned} \partial_t S' + w S_z &= D_S \Delta S' \\ \partial_t T' + w T_z &= D_T \Delta T', \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

wobei T' und S' Störungen der anfänglichen Verteilung beschreiben.

Durch Einsetzen von (2.1.5) in (2.1.8) erhält man somit folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} (\partial_t - \nu \Delta) \Delta w &= -g \Delta_{xy} (\alpha_T T' + \alpha_S S') \\ (\partial_t - D_S \Delta) S' &= -S_z w \\ (\partial_t - D_T \Delta) T' &= -T_z w \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Dieses Gleichungssystem wird allgemein zur Analyse der doppelt-diffusiven Konvektion verwendet (siehe beispielsweise [49, 3, 41]). Es wurde in dieser Herleitung zwar durch eine Linearisierung gewonnen, ist in dieser Form unter Vernachlässigung von horizontalen Strömungen aber auch bei endlichen Amplituden der Störungen (d. h. Fingern) gültig [3, 39].

Durch den Lösungsansatz

$$w, T', S' \sim e^{\Lambda t} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (2.1.11)$$

mit den Wellenzahlvektoren $k_{xy}^2 \equiv k_x^2 + k_y^2$ und $k^2 \equiv k_{xy}^2 + k_z^2$, erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$\Lambda \begin{pmatrix} w \\ S' \\ T' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nu k^2 & -g \frac{k_{xy}^2}{k^2} \alpha_S & -g \frac{k_{xy}^2}{k^2} \alpha_T \\ -S_z & -D_S k^2 & 0 \\ -T_z & 0 & -D_T k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ S' \\ T' \end{pmatrix}$$

Die Wachstumsrate Λ muß dabei folgende Gleichung erfüllen:

$$(\Lambda + \nu k^2)(\Lambda + D_S k^2)(\Lambda + D_T k^2) - g \frac{k_{xy}^2}{k^2} \alpha_T T_z (\Lambda + D_S k^2) - g \frac{k_{xy}^2}{k^2} \alpha_S S_z (\Lambda + D_T k^2) = 0 \quad (2.1.12)$$

Diese kubische Polynom wurde beispielsweise in [3] untersucht. Es existieren verschiedene Lösungstypen für Λ ; so sind die Fälle von drei reellen Lösungen oder einer reellen und zwei konjugiert komplexen Lösungen möglich. Der Fall von zwei konjugiert komplexen Lösungen beschreibt die oszillatorische Instabilität und wird im Folgenden nicht weiter betrachtet. Der Fall der drei reellen Lösungen beschreibt die doppelt-diffusive Finger-Instabilität.

Anfänglich infinitesimal kleine Störungen verstärken sich, wenn der Realteil von Λ positiv ist. Die Grenze zwischen der Verstärkung und Dämpfung von infinitesimalen Störungen verläuft bei $Re\{\Lambda\} = 0$. Für den Fall einer Schicht der Dicke h und konstanten Konzentrationsgradienten ergibt sich damit die Bedingung für die doppelt-diffusive Finger Instabilität (siehe z.B. [3]):

$$\tau R_S > R_T + \frac{27}{4} \pi^4 \quad (2.1.13)$$

Hierbei ist $\tau \equiv \frac{D_T}{D_S} > 1$ das Verhältnis der Diffusionskonstanten. Die dimensionslosen Größen

$$R_T = \frac{\alpha_T g h^4 T_z}{D_T \nu} > 0$$

$$R_S = \frac{-\alpha_S g h^4 S_z}{D_T \nu} > 0$$

sind analog zur Rayleigh Zahl Ra definiert (siehe z.B. [19], §56 oder [2], Kap 7.3). Die Ungleichungen $R_T > 0$, $R_S > 0$ gelten unabhängig von den verwendeten Substanzen. Typischerweise, und insbesondere auch bei dem in dieser Arbeit verwendeten System¹, gilt $R_T \gg \frac{27}{4} \pi^4$ und $\tau R_S \gg \frac{27}{4} \pi^4$. Damit kann der zweite Term in der Bedingung 2.1.13 vernachlässigt werden und es folgt

$$R_\rho < \tau \quad (2.1.14)$$

mit dem sogenannten Stabilitätsverhältnis $R_\rho = -\frac{\alpha_T T_z}{\alpha_S S_z}$. Diese Bedingung entspricht der erstmalig von [49] hergeleiteten Bedingung für die doppelt-diffusive Finger-Instabilität. Der Unterschied von $\frac{27}{4} \pi^4$ beruht auf der Tatsache, daß in der Herleitung der Bedingung 2.1.13 berücksichtigt wurde, daß in der betrachteten Schicht der Dicke h nur bestimmte Wellenzahlvektoren auftreten können. Dies blieb in der Herleitung von 2.1.14 unberücksichtigt.

Aufgrund der ‘gravitationsbedingt stabilen’ Gesamtverteilung gilt $R_\rho > 1$, d. h. der Betrag des Dichtegradienten der stabilisierenden Substanz ist größer als der der destabilisierenden. Damit erhält man den Bereich

$$1 < R_\rho < \tau \quad (2.1.15)$$

¹Als Vorgriff auf Kap. 2.3.1 (Seite 22): In dem später verwendeten System gilt $\nu = 1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $D_T = 1 \cdot 10^{-10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $D_S = 3 \cdot 10^{-12} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\alpha_T = 0.26 \frac{1}{\text{VolTeile}}$, $\alpha_S = -0.05 \frac{1}{\text{VolTeile}}$, $h \approx 2 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, $\Delta T, \Delta S \approx 0.05 \text{ VolTeile}$, $T_z \approx \frac{\Delta T}{h}$, $S_z \approx \frac{\Delta S}{h}$. Hieraus ergibt $R_T \approx 10^4$, $\tau R_S \approx 8 \cdot 10^4 \gg \frac{27}{4} \pi^4 \approx 658$.

für die doppelt-diffusiven Finger-Instabilität.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Wellenlängen eines doppelt-diffusiven Systems untersucht. Stern [49] hat als erster näherungsweise die maximale Wachstumsrate Λ und die dazugehörige Wellenlänge λ aus Gl. 2.1.10 bzw. 2.1.12 berechnet. Mit der hier verwendeten Nomenklatur lauten diese:

$$\Lambda \approx (g\alpha_T T_z)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{R_\rho \tau^3}{4\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.1.16)$$

$$\lambda \approx \left(\frac{\nu D_T}{g\alpha_T T_z} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \sqrt{2\pi} \quad (2.1.17)$$

Dabei wurden konstante Gradienten in vertikaler Richtung vorausgesetzt; die Näherungen gelten unter den Bedingungen $\tau \gg R_\rho \gg 1$, $\sigma \equiv \frac{\nu}{D_T} > 1$.

Ohne diese einschränkenden Bedingungen wurden die Gleichungen für die Wachstumsrate und die Wellenlänge von Schmitt [37, 38] hergeleitet. Die Gleichungen für die maximale Wachstumsrate Λ und den dazugehörigen Wellenzahlvektor k_{xy} lauten:

$$\Lambda = (g\alpha_T T_z)^{\frac{1}{2}} \cdot G(R_\rho, \gamma, \tau, \sigma) \quad (2.1.18)$$

$$k_{xy} = \left(\frac{g\alpha_T T_z}{\nu D_T} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot M(R_\rho, \gamma, \tau, \sigma) \quad (2.1.19)$$

mit der Prandtl Zahl $\sigma = \frac{\nu}{D_T}$ und dem Verhältnis der Flüsse $\gamma = -\frac{\alpha_T T'}{\alpha_S S'}$. Die dimensionslose Wachstumsrate G und Wellenlänge M sind in [37, 38] gegeben.

Die Formeln von Stern (Gl. 2.1.16 und 2.1.17) ergeben sich aus den Formeln von Schmitt (Gl. 2.1.18 und 2.1.19) unter den oben angeführten Bedingungen. Für die späteren Untersuchungen sind in besonderem Maße die Abhängigkeit der Wachstumsrate und Wellenlänge vom Konzentrationsgradienten T_z relevant.

2.2 Simulationsmethoden

Im Rahmen dieser Arbeit wird die doppelt-diffusive Finger-Instabilität anhand numerischer Simulationen untersucht. Bisherige Arbeiten auf diesem Gebiet beschränkten sich hauptsächlich auf zweidimensionale Systeme [42, 45, 43, 44, 46, 62], realistischere dreidimensionale Untersuchungen wurden in [35, 36] durchgeführt. In diesen Arbeiten wurde eine vereinfachte Form der Navier-Stokes Gleichungen verwendet, bei der der Term $(\vec{v}\vec{\nabla})\vec{v}$ vernachlässigt wird. Diese Näherung wird bei kleinen Strömungsgeschwindigkeiten verwendet. Im Gegensatz zu den zuvor durchgeführten Arbeiten wird in dieser Arbeit der Einfluß von Strömungen über denen der reinen doppelt-diffusiven Konvektion hinaus untersucht. Aus diesem Grund werden die Navier-Stokes Gleichungen ohne diese Vereinfachung simuliert.

Die Simulation geschieht mit einem selbstgeschriebenen Programm, da zum Einen die Simulation zweier gelöster Substanzen zwingend erforderlich ist und desweiteren unterschiedliche Rand- und Anfangsbedingungen untersucht werden. Dies ist nur durch eine eigene Implementation zu realisieren. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Physik der doppelt-diffusiven Konvektion, demzufolge werden bei der Umsetzung etablierte Algorithmen verwendet. Aufgrund der großen Relevanz der Hydrodynamik existieren zur numerischen Lösung der Navier-Stokes Gleichungen eine Vielzahl unterschiedlicher Lösungsverfahren; die hauptsächlich verwendeten Verfahren sind die Methode der Finiten Differenzen, der Finiten Volumina und der Finiten Elemente.

Die Methode der finiten Differenzen basiert auf den Navier-Stokes Gleichungen in ihrer differentiellen Form. Das zu lösende System wird mit einem Gitter überzogen, an dessen Gitterpunkten die numerischen Werte der einzelnen Variablen lokalisiert sind. Die partiellen Ableitungen werden durch die Werte an den einzelnen Gitterpunkten approximiert. Die Methode der finiten Volumina verwendet die Navier-Stokes Gleichungen in ihrer integralen Form im Gegensatz zu der bisherigen Darstellung in differentieller Form. Das Lösungsgebiet wird unterteilt in angrenzende Kontrollvolumina. Die Variablen werden in der Mitte der Kontrollvolumina berechnet, durch Interpolation werden die Werte dieser Variablen an der Oberfläche dieser Volumina ermittelt. Die Methode der finiten Elemente basiert auf der gleichen Grundidee wie die Methode der finiten Volumina. Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß die zu integrierenden Gleichungen mit einer Gewichtungsfunktion multipliziert werden um eine Approximation des Kontrollvolumens zu erhalten. Details zu diesen Algorithmen sowie deren Vor- und Nachteilen können beispielsweise [8] entnommen werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Methode der finiten Volumina verwendet. Diese hat den Vorteil einer einfachen Umsetzbarkeit aufgrund der physikalischen Bedeutung der in den Algorithmen verwendeten Variablen. Diese Methode wird im folgenden Abschnitt erklärt. Die praktische Umsetzung wird nach [8] realisiert. Dort können auch weitere Details sowie weitergehende Erläuterungen entnommen werden.

2.2.1 Simulationsmodell

Es wird eine inkompressible, viskose Flüssigkeit mit zwei gelösten und diffundierenden Substanzen in der Boussinesq-Oberbeck Approximation simuliert. Im Rahmen dieser Arbeit wird mit drei Raumdimensionen gearbeitet.

Das Gleichungssystem sieht somit folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}
 \partial_t \vec{v} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} &= (1 + \alpha_T T + \alpha_S S) \vec{g} - \frac{1}{\rho_0} \vec{\nabla} p + \nu \Delta \vec{v} \\
 \partial_t S + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) S &= D_S \Delta S \\
 \partial_t T + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) T &= D_T \Delta T \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

Dieses System hat 6 Variablen (die Skalare T , S und p sowie das Vektorfeld \vec{v}) und besteht aus 6 Gleichungen. Für den Druck p existiert keine explizite Gleichung; dieser wird indirekt durch die anderen Variablen mitbestimmt. Somit kann man den Druck als “einen Lagrangemultiplikator betrachten, um das Strömungsfeld divergenzfrei zu machen.” (Sinngemäßes Zitat von Prof. Turek, Universität Dortmund). Zur Berechnung des Drucks wird durch die Umstellung der ersten Gleichung nach $\vec{\nabla} p$ und der Anwendung der Divergenz eine Poisson Gleichung gebildet.

Das zu simulierende Gebiet wird in quadratische Kubi unterteilt. Aufgrund der Methode der finiten Volumina werden die Navier-Stokes Gleichungen in integraler Form über diese Volumina bzw. ihre Oberflächen approximiert ([8], Kap. 4 und Kap. 7.5). Die räumlichen Ableitungen zur Berechnung der Werte in einem Kontrollvolumen werden mit den sechs angrenzenden Volumina gebildet. Die Zeitintegration erfolgt implizit unter Berücksichtigung der beiden vorhergehenden Integrationsschritte ([8], Kap. 6.3.2). Der Druck wird mit dem SIMPLE Algorithmus berechnet ([8], Kap. 7.3.4).

Für jede der sechs Unbekannten entsteht ein Gleichungssystem mit N Unbekannten, wobei N der Anzahl der Kontrollvolumina entspricht. Zur Lösung eines N -dimensionalen Gleichungssystem benötigt man im Allgemeinen eine $N \times N$ -Matrix für die Koeffizienten. Da in dem hier betrachteten System die Unbekannten nur mit ihren nächsten Nachbarn wechselwirken und somit nur wenige Koeffizienten ungleich Null auftreten, ist die Koeffizientenmatrix dünn besetzt. Aufgrund der großen Anzahl der Kontrollvolumina ($N \gtrsim \mathcal{O}(10^6)$) werden nur die Koeffizienten ungleich Null gespeichert.

Bei einer Lösung des Gleichungssystems durch Gauß-Elimination verhält sich die Laufzeit in Abhängigkeit von der Anzahl der Unbekannten gemäß N^3 . Dieser Algorithmus zieht keinen Vorteil aus der Tatsache, daß die Koeffizientenmatrix schwach besetzt ist. Demzufolge wird er in der Simulation von Strömungen nur selten verwendet. Darüberhinaus gibt es iterative

Algorithmen zur Lösung von Gleichungssystemen. Diese verwenden eine geratene Lösung (in der Regel die Lösung des vorherigen Integrationsschritt), um diese iterativ zu verbessern. Wenn die Anzahl der Iterationen gering ist und eine Iteration wenig Laufzeit benötigt, können diese Algorithmen schneller sein als eine direkte Lösung. Der durch die Verwendung eines iterativen Algorithmus entstehende Fehler der Lösung ist bei einer geeigneten Realisierung im Allgemeinen viel geringer als der des Diskretisierungsschemas. In dieser Arbeit wird der iterativer Algorithmus ‘strongly implicate procedure’ (SIP) verwendet ([8], Kap. 5.3.4). Dieser Algorithmus basiert auf einer Zerlegung der Koeffizientenmatrix in Dreiecksmatrizen und zeigt ein gutes Konvergenz- und Laufzeitverhalten ([8], Kap. 5.7).

Details zur praktischen Umsetzung dieser Algorithmen können [8] entnommen werden. Diese werden mit einem in der Programmiersprache C/C++ geschriebenen Programm implementiert. Der Quellcode dieses und der zur weiteren Auswertung verwendeten Programme sind beim Autor erhältlich, da ein Abdruck aufgrund der Länge und der geringen Aussagekraft als unpraktisch erscheint.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Reihenuntersuchungen zur Bestimmung der Wellenlänge und der Wachstumszeit mit $1 \cdot 10^6$ Kontrollvolumina durchgeführt, dies entspricht einem Speicherplatzbedarf von 180 MB RAM. Die Laufzeit variiert hierbei zwischen einigen Stunden und einem Tag. Desweiteren werden Untersuchungen an großen Systemen mit $5 - 10 \cdot 10^6$ Kontrollvolumina durchgeführt. Der notwendige Speicherplatzbedarf beträgt hierbei $0.9 - 1.8$ GB RAM. Dies entspricht der oberen Grenze der zur Verfügung stehende Rechenkapazität. Diese Simulation beanspruchen typischerweise Laufzeiten von einigen Tagen bis zu einer Woche.

2.2.2 Rand- und Anfangsbedingungen

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei verschiedene Randbedingungen verwendet; dies sind geschlossene und periodische Randbedingungen.

Geschlossene Randbedingungen bedeuten einen ‘no-slip’, ‘no-flux’ Rand. Eine ‘no-slip’ Randbedingung bedeutet, daß an der Wand die Geschwindigkeit der Strömung der der Wand entspricht. Im Allgemeinen werden in dieser Arbeit Ränder ohne Geschwindigkeit verwendet, d. h. die Flüssigkeit ruht am Rand. Externe Strömungen können aber durch diese Randbedingung sehr einfach simuliert werden, da eine Bewegung des Randes aufgrund der simulierten Gleichungen Strömungen im Inneren des Systems bewirkt. Weiterhin ist diese Wand adiabatisch, d. h. es findet keine Diffusion von T oder S durch diese Wand statt. Aus diesem Grund wird dies auch als ‘no-flux’ Randbedingung bezeichnet. Diese beiden Bedingungen ergeben einen geschlossenen Rand; dies entspricht einer undurchlässigen Wand. Dieser Rand wird für die obere und unterere Begrenzung des Systems verwendet.

Als zweite Randbedingung werden periodische Ränder simuliert. Dies bedeutet, daß \vec{v} , T , S

und p periodisch fortgesetzt werden. Diese Randbedingung wird für die seitlichen Ränder der meisten Simulationen verwendet. Dies hat den Vorteil, daß die zur Strukturbildung notwendigen Strömungen und Diffusionen keinen seitlichen, externen Einflüssen ausgesetzt sind. Eine geschlossene Randbedingung würde beispielsweise aufgrund ihrer ‘no-slip’ Eigenschaft das Strömungsfeld beeinflussen, welches bei der Simulationen der doppelt-diffusiven Konvektion zu einer Ausrichtung der Strukturen führen würde. Diese Orientierung der Strukturen ist in den Experimenten zu dieser Arbeit auch beobachtet worden, ebenso in wie in anderen Systemen (siehe z. B. [48]), ist aber ein unerwünschter Effekt in den späteren Simulationen. Mit zunehmendem Abstand vom Rand des System ist experimentell ein sinkender Einfluß des Randes auf die Orientierung der Strukturen zu beobachten. Typischerweise ist dieser Einfluß bei $\approx 3 - 5$ Wellenlängen der Strukturen nicht mehr erkennbar. Da die Simulationen zeit- und speicherplatzintensiv sind und dieser Randeinfluß nicht Gegenstand der später folgenden Untersuchungen sein soll, wird dies durch die Verwendung von periodischen Randbedingungen umgangen.

Zu Beginn der Simulation werden die lokalen Konzentrationen T und S mit den gewünschten Werten initialisiert. Typischerweise werden Systeme mit keinen anfänglichen Konzentrationen T und S in einem oberen Bereich und endlichen Konzentration an T und S im unteren Bereich simuliert. Die Konzentrationen werden grundsätzlich so gewählt, daß das System ‘gravitationsbedingt stabil’ ist.

2.2.3 Zweidimensionale Simulationen

Zu Beginn der Untersuchungen in dieser Arbeit werden Simulationen mit einem zweidimensionalen Modell durchgeführt. Dies entspricht zwar nicht der Realität — aus diesem Grund wird es auch nicht weiter verwendet — eignet sich aber gut für eine erste qualitative Erläuterung der Simulationsergebnisse.

Die zeitliche Entwicklung dieses Systems ist in Abbildung 2.2.1 dargestellt. Die bei dieser Simulation verwendeten Parameter der Navier-Stokes Gleichungen entsprechen denen der späteren Untersuchungen. Zu Beginn sind in der oberen Hälfte des System keine Substanzen vorhanden. Von der Mitte ausgehend nehmen die Konzentrationen linear von Null zu T_0 und S_0 am Boden zu. Da diese Verteilung ‘gravitationsbedingt stabil’ ist, entstehen keine Konvektionsströmungen. Im Laufe der Zeit breitet sich das anfängliche Konzentrationsprofil durch Diffusion aus. Nach einer gewissen Zeit entstehen durch doppelt-diffusive Konvektion fingerartige Strukturen, die schnell deutlicher werden und nach oben wachsen.

Diese Strukturen sind in Abb. 2.2.2 im Detail dargestellt. Anhand der Bilder in dieser Abbildung ist die fingerartige Struktur in S wie zuvor deutlich zu erkennen. Die Graufärbung dieser Bilder spiegelt sich in der jeweils darunter dargestellten S Isokonzentrationslinien wieder, da

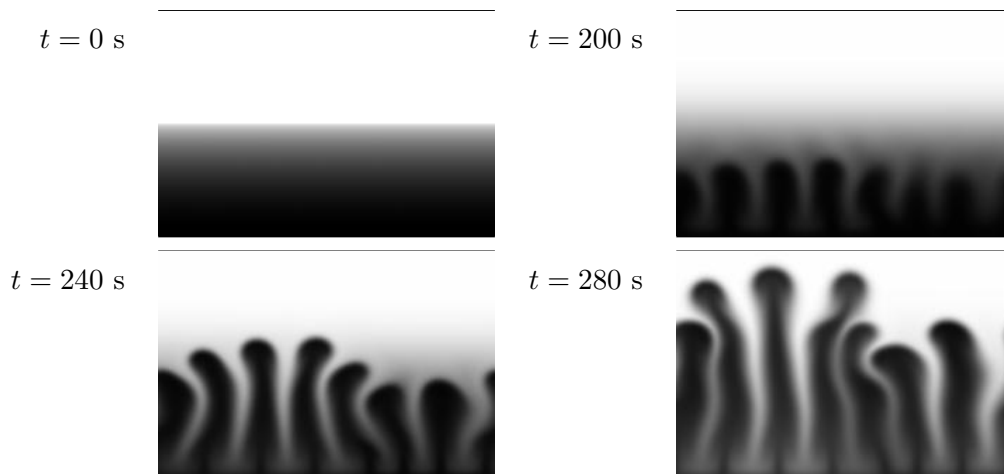


Abbildung 2.2.1: 2d Simulation mit periodischen Randbedingungen in horizontaler und geschlossenen Randbedingungen in vertikaler Richtung. Anfänglich nehmen die Konzentrationen T und S von der Mitte bis zum Boden linear zu. Dargestellt ist die destabilisierende Substanz S ; eine dunklere Färbung bedeutet eine höhere Konzentration. $T_0 = S_0 = 0.05$ VolTeile, Bildgröße 1.2×0.8 mm.

dies nur unterschiedliche Darstellungsformen der gleichen Werte sind. Bei $t = 280$ s zeigt sich in der Darstellung der Isokonzentrationslinien eine unübersichtliche Struktur, da diesen Linien ohne eine entsprechende Beschriftung nicht die jeweilige Konzentration zu entnehmen ist. Da jede einzelne Linie für eine eindeutige Darstellung gekennzeichnet werden müßte, erscheint dieses Vorgehen als wenig praktikabel. Aus diesem Grund wird in der weiteren Arbeit mit Graustufenbildern zur anschaulichen Darstellung gearbeitet.

Weiterhin sind in dieser Abbildung Stromlinien dargestellt. Diese Linien sind so definiert, daß zwischen zwei Linien die selbe Menge an Flüssigkeit pro Zeiteinheit hindurch fließt. Somit führt eine lokal schnellere Strömung zu dichter liegenden Stromlinien. Die Strömungsrichtung ist in dieser Darstellung nicht zu erkennen. Anhand der Abbildung von $|\vec{v}|$ in 2.2.2 ist eine rollenförmige Struktur in den Stromlinien zu erkennen, wobei die Anzahl der Rollen doppelt so groß ist wie die der Finger. Die in der Abbildung für $t = 200$ s dargestellten Pfeile zeigen die Richtung der vertikalen Strömungskomponente an. Durch einen Vergleich mit der Fingerstruktur ist zu erkennen, daß innerhalb eines Fingers die Flüssigkeit nach oben strömt und Bereich zwischen den Fingern nach unten. Somit besitzen die Konzentration S und die vertikale Strömungskomponente die gleiche Periodizität. Dies entspricht dem Lösungsansatz (Gl. 2.1.11 auf Seite 11) zur theoretischen Bestimmung der Wellenlänge und der Wachstumszeit. Die vertikalen Strömungen schließen sich zu Rollen, somit besitzt jeder Finger zwei Konvektionsrollen. Die periodischen Randbedingungen sind deutlich an den Strom- und Isokonzentrationslinien zu erkennen.

In der stabilisierenden Substanz T sind hingegen nahezu keine Strukturen zu erkennen. Durch Strömungen entstehende Konzentrationsunterschiede werden durch Diffusion aufgrund des höheren Diffusionskoeffizienten ausgeglichen.

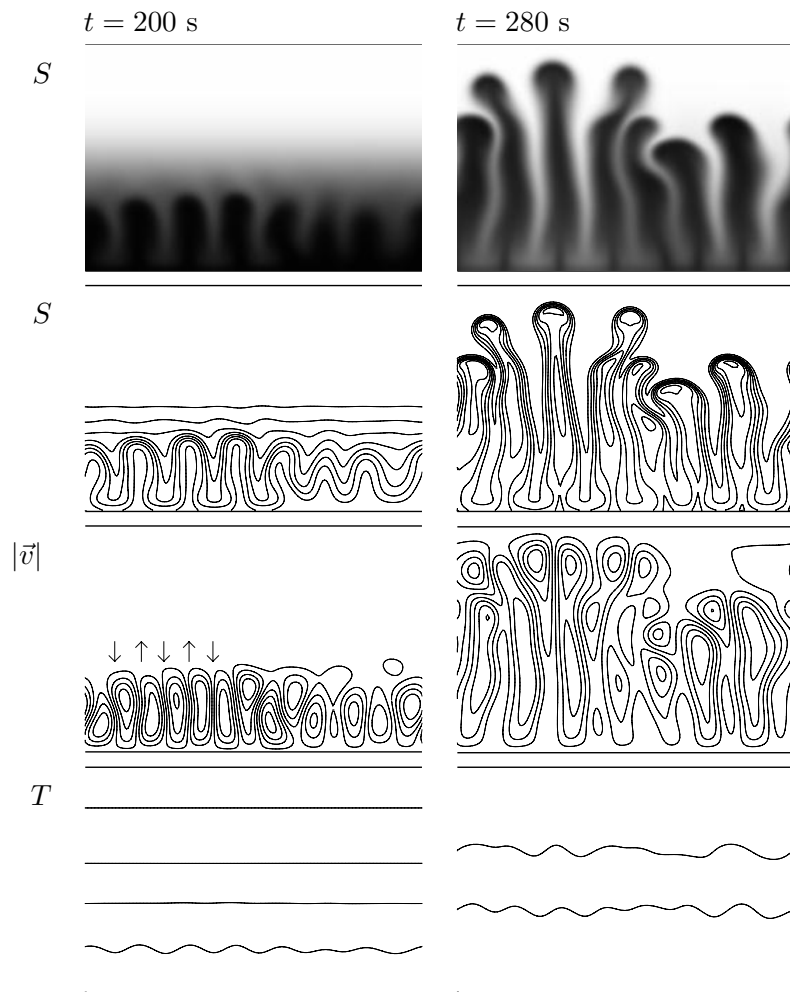


Abbildung 2.2.2: Detaillierte Darstellung der Simulation aus Abb. 2.2.1 mit den Konzentrationen der destabilisierenden (S) und stabilisierenden Substanz T sowie den Stromlinien von $|\vec{v}|$ zu unterschiedlichen Zeiten.

Da die Struktur der Strömungen erwartungsgemäß der Fingerstruktur in S entspricht, und die Strukturen in T nur schwach ausgeprägt sind, wird in den folgenden Untersuchungen nur die destabilisierende Substanz S betrachtet. Darüberhinaus ist S die Observable der Experiments und damit direkt mit den Simulationen vergleichbar.

2.2.4 Dreidimensionale Simulationen

In den späteren Untersuchungen werden grundsätzlich dreidimensionale Simulationen verwendet, da diese den Experimenten entsprechen. Die zeitliche Entwicklung einer typischen Simulation in der Aufsicht ist in Abb. 2.2.3 dargestellt. Bei dieser Simulation wird die gleiche Anfangsbedingung wie bei der Simulation aus Abb. 2.2.1 verwendet. In x und y Richtung wer-

den periodische Randbedingungen verwendet, in z Richtung ist das System durch geschlossene Randbedingungen begrenzt.

Zur Darstellung wurde die Konzentration der destabilisierenden Substanz S entlang der z -Achse summiert und bezüglich S_0 normiert. Eine höhere Konzentration ist dunkler dargestellt. In der Abbildung 2.2.3 ist, ausgehend von einer gleichförmigen Verteilung, eine deutlich werdende wabenförmige Struktur zu erkennen. Die dunkleren Stellen dieser Struktur werden durch Finger gebildet, da ein Finger durch eine höhere Konzentration an S entlang der vertikalen Achse gekennzeichnet ist (siehe Abb. 2.2.2). Die helleren Stellen entsprechen den Zwischenräumen. Die zunehmende Deutlichkeit der Strukturen entsteht durch das Wachstum der Finger. Die Entstehung der fingerartigen Strukturen in S sowie das Verhalten der Konzentration in T und der Strömungen entspricht in allen Punkten der vorher dargestellten zweidimensionalen Simulation. Aus diesem Grund wird auf eine genauere Darstellung verzichtet.

Im Laufe der Zeit ist eine zunehmende Wellenlänge der Strukturen zu erkennen. Aufgrund der fehlenden ausgezeichneten Orientierung der Strukturen und der periodischen Randbedingungen, ist dies durch eine laufende Umorientierung der Strukturen in der horizontalen Ebene möglich. Bei zweidimensionalen Simulationen wird dies unterdrückt, da ein ganzzah-

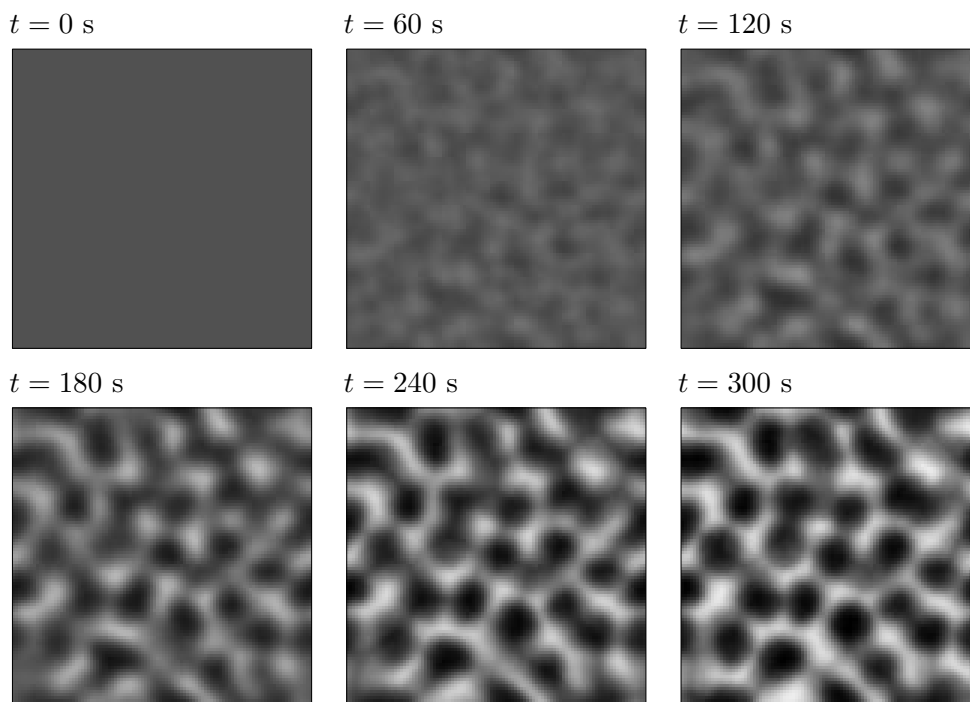


Abbildung 2.2.3: Aufsicht einer dreidimensionalen Simulation mit periodischen Randbedingungen in x und y Richtung. Dargestellt ist die in z -Richtung summierte Konzentration S , eine dunklere Färbung bedeutet eine höhere Konzentration. Alle Bilder besitzen die gleiche Grauwertskalierung bezüglich S . Bildgröße 1×1 mm.

liges Vielfaches der Wellenlänge die Länge des Systems ergeben muß. Dies ist ein Vorteil von drei- gegenüber zweidimensionalen Simulationen und entspricht besser den experimentellen Gegebenheiten. Diese besitzen zwar geschlossene Randbedingungen, aufgrund der Größe der experimentellen Systeme gegenüber den auftretenden Wellenlängen sind kontinuierliche Veränderungen von dieser möglich.

Die soeben beschriebenen Strukturen und ihre zeitliche Entwicklung sind der Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit.

2.3 Experimentelle Grundlagen

Im Rahmen dieser Arbeit werden für die Experimente zwei verschiedene Systeme verwendet. Das Glycerid/Glucose System wird aufgrund seiner Natur nur für qualitative Untersuchungen verwendet; dies wird später erklärt. Das Tensid/Glyzerin System dient den quantitativen Untersuchungen. Für einen quantitativen Vergleich mit Experimenten und Theorien ist die Kenntnis der relativen Dichten α_T und α_S , der Diffusionskonstanten D_S und D_T und der Viskosität ν erforderlich. Dies wird im Folgenden erläutert.

2.3.1 Tensid/Glyzerin System

Als stabilisierende Substanz wird Glyzerin verwendet. Glyzerin hat eine Dichte von $\rho = 1.26 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ (Herstellerangabe); hieraus ergibt sich eine relative Dichte von 0.26 gegenüber Wasser. Die Diffusionskonstante beträgt $1 \cdot 10^{-10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. Glyzerin ist beispielsweise bei SIGMA-ALLDRICH, Taufkirchen, Deutschland erhältlich.

Als destabilisierende Substanz wird das Tensid ‘Polyethylen 4 Lauryl Ether’ (Handelsname ‘Brij 30’) verwendet. Dies ist bei SIGMA-ALLDRICH erhältlich. Dieses Tensid hat eine Dichte von $\rho = 0.95 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ (Herstellerangabe). Somit ergibt sich eine relative Dichte von -0.05 gegenüber Wasser. Die chemische Summenformel dieses Tensids lautet $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{n-1}-(-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_m-\text{OH}$ mit $m = 4$ und $n = 12$. Wie man anhand der chemischen Formel erkennen kann, gehört es zur Gruppe der Alkohol Ethoxylate. Da in dieser Arbeit nur mit diesem speziellen Tensid gearbeitet wird, wird es im Folgenden einfach als Tensid bezeichnet.

In wässriger Lösung aggregiert das Tensid aufgrund seiner amphiphilen Natur. Die spezielle Form der Aggregation hängt dabei im Allgemeinen von der Konzentration und der Umgebungstemperatur ab [32]; dies beeinflusst den Diffusionskoeffizienten. Dieser wurde jedoch in den theoretischen Betrachtungen als konstant angesehen. Aus diesem Grund werden nur Tensidkonzentrationen $S_0 < 0.1$ VolTeile untersucht, da in diesem Bereich das Tensid in Mizellen agglomeriert [32, 30]. Bei größeren Konzentrationen $S_0 \gtrsim 0.2$ VolTeile agglomeriert das Tensid in Lamellen. Bei diesen Tensidkonzentrationen kann experimentell keine doppeldiffusive Strukturbildung mehr beobachtet werden. Schematisch ist eine elongierte Mizelle in Abb. 2.3.1 dargestellt. Diese Mizellenform wurde im Vorfeld dieser Arbeit von Prof. Winter, Fachbereich Physikalische Chemie, Universität Dortmund, durch Röntgenkleinwinkelstreuung bestimmt (siehe hierzu auch [31]) und anschließend daraus die Diffusionskonstante D_S

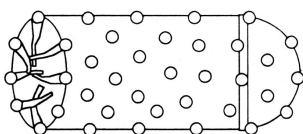


Abbildung 2.3.1: Schematische Darstellung einer elongierten Mizelle. Die hydrophilen Enden des Tensids befinden sich außen, die hydrophoben Enden sind nach innen gerichtet (aus [32]).

abgeschätzt. Der Logarithmus der gestreuten Intensität wurde gegen den Logarithmus des Streuvektors aufgetragen. In dieser Darstellung verliefen die Meßpunkte auf einer Gerade mit Steigung ≈ -1 . Dies ist nur bei stäbchenförmigen Streuzentren der Fall. Der Durchmesser der elongierten Mizellen ergibt sich aus der Moleküllänge des Tensid zu ≈ 5 nm. Da das Tensid trüb erscheint in wässriger Lösung, und die Länge der Mizellen oberhalb der Auflösung der Meßapparatur lag, ergab sich eine untere Grenze der Mizellenlänge von $\gtrsim 400$ nm. Diese Geometrie beeinflußt den Diffusionskoeffizienten. Dieser ist für stäbchenförmige Teilchen um den Faktor $f/f_0 = \frac{(2/3)^{1/3} P^{2/3}}{\ln 2P - 0.3}$ kleiner als der des entsprechenden kugelförmigen Teilchens [61], wobei P der Quotient aus Länge und Durchmesser des Stabes ist. Für das hier betrachtete Tensid ergibt sich mit $P \gtrsim 80$ der Wert $f/f_0 \gtrsim 3.3$. Da die Diffusionskonstante aufgrund des Stokes'schen Gesetz [19] umgekehrt proportional zum Radius der gelösten Teilchens ist, und der Durchmesser von Glycerinmolekülen zu ≈ 0.5 nm abgeschätzt werden kann, ergibt sich ein Verhältnis der Diffusionskonstanten von $\tau \equiv D_T/D_S \gtrsim 3.3 \cdot 5 \text{ nm}/0.5 \text{ nm} = 33$. Diese Abschätzung ergibt somit eine Diffusionskonstante von $D_S \approx 3 \cdot 10^{-12} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

Eine weitere Abschätzung des Diffusionskoeffizienten D_S kann über die später diskutierten Strukturen erfolgen. Diese in Abbildung 4.2.4 (Seite 100) und Abb. 4.2.5 dargestellten Strukturen verdoppeln ihre Dicke in 40 – 55 min. Der typische Durchmesser beträgt $\approx 200 \mu\text{m}$. Die mittlere zurückgelegte Strecke eines suspendierten Teilchens ergibt sich aus $\sqrt{6D_S t}$ ([19], §60). Hieraus ergibt sich ein Diffusionskoeffizient von $(2.0 - 3.7) \cdot 10^{-12} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$; dieser Wert ist mit der vorherigen Abschätzung verträglich.

Auf eine Verbesserung der Genauigkeit dieser Abschätzung wird kein Wert gelegt, da die Diffusionskonstante D_S in der theoretischen Berechnung der Wellenlänge nicht eingeht (siehe Gl. 2.1.17 auf S. 13). Desweiteren wird in den auf der Wachstumsrate (siehe Gl. 2.1.16 und 2.1.18 auf S. 13) aufbauenden theoretischen Überlegungen von einem konstanten Verhältnis der Diffusionskonstanten τ ausgegangen. Dies kann durch die bisherigen Ergebnisse und der in [30] experimentell nachgewiesenen Agglomeration in Mizellenform aufgrund des hier verwendeten Konzentrationsbereichs $S_0 \leq 0.1$ VolTeile als gesichert angesehen werden.

Da die Beobachtung der doppelt-diffusiven Strukturen durch die Trübung des Wassers durch das Tensid erfolgt, ergibt sich eine untere Grenze der verwendeten Tensidkonzentration von $3 \cdot 10^{-3}$ VolTeile. Unterhalb dieser Grenze ist die Trübung zu schwach, um doppelt-diffusive Strukturen eindeutig zu beobachten.

Die Viskosität des Systems wurde in [31] zu $\nu \approx 1.1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ bestimmt. In Abhängigkeit von der Konzentration T_0 und S_0 sind keine Veränderungen der Viskosität gemessen worden. Im Rahmen dieser Arbeit ist die Messung der Viskosität im Fachbereich Physikalische Chemie, Universität Dortmund, mit einem Kapillarrisosimeter erneut durchgeführt worden. Diese Messung ergibt ein übereinstimmendes Ergebnis von $\nu \approx 1.1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. Die Viskosität ist somit geringfügig höher als die von reinem Wasser.

Diese Werte von $\alpha_T = 0.26 \frac{1}{\text{VolTeile}}$, $\alpha_S = -0.05 \frac{1}{\text{VolTeile}}$, $D_S = 1 \cdot 10^{-10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $D_T = 3 \cdot 10^{-12} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$

und $\nu = 1.1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ werden grundsätzlich in den folgenden Simulationen und theoretischen Überlegungen verwendet.

2.3.2 Glycerid/Glucose System

Das für Demonstrationszwecke verwendete Glycerid/Glucose System ist im Lebensmittel-Alltag als Kaffeeweisser bekannt. Laut Herstellerangabe (Fa. Krüger, Bergisch Gladbach) besteht es unter anderem aus Glucose und Mono- und Diglyceride der Laurylsäure. In Wasser wirken diese aufgrund ihres amphiphilen Charakters als Emulgatoren und bilden in Verbindung mit dem vorhandenen Kokosfett eine Emulsion in Wasser.

Die Lösung von Kaffeeweisser in Wasser besitzt eine höhere Dichte als reines Wasser, die leichtere Substanz diffundiert schlechter, demzufolge entsprechen die Relationen der Materialkonstanten denen des Tensid/Glyzerin Systems. Aufgrund der Natur des Systems sind die Konzentrationen parallel variierbar, so daß immer $\frac{T_0}{S_0} = \text{const}$ gilt. Darüberhinaus besteht das Glycerid/Glucose System allerdings noch aus weiteren Substanzen, die es für quantitative Vergleiche unbrauchbar machen. In der Praxis überzeugt jedoch die einfache Handhabbarkeit; aus diesem Grund eignet es sich didaktische Zwecke [25, 17]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden verschiedene Marken (Krügers, Cafita, Coffeeta, Coffeemate, van Hook's (Chile)) auf ihre Tauglichkeit als doppelt-diffusives Strukturbildungssystem untersucht. Die später beschriebenen Strukturen treten bei allen Systemen auf.

2.4 Aufbau und Durchführung der Experimente

Zur Durchführung eines Experimentes mit dem Tensid/Glyzerin System wird vor Beginn des eigentlichen Experimentes eine Tensidmenge mit Volumen V_S in vollentsalztes Wasser mit Volumen $V_{\text{H}_2\text{O}}$ gegeben; diese Mischung wird ca. 10 Minuten mit dem Magnetrührer gemischt. Dies soll die Tensidagglomeration garantieren [32]. Anschließend wird das Glyzerin mit Volumen V_T hinzugegeben und weiter gemischt. Aus den drei bekannten Volumina ergeben sich dann die Konzentrationen $T_0 = V_T / (V_{\text{H}_2\text{O}} + V_T + V_S)$ und $S_0 = V_S / (V_{\text{H}_2\text{O}} + V_T + V_S)$.

Für die Verwendung des Glycerid/Glucose Systems wird die gewünschte Menge der Ausgangssubstanz mit der Masse M_C abgewogen und in vollentsalztes Wasser mit der Masse $M_{\text{H}_2\text{O}} = \rho_{\text{H}_2\text{O}} V_{\text{H}_2\text{O}}$ gegeben; anschließend wird dies mit einem Magnetrührer bis zur vollständigen Auflösung durchmischt. Die Konzentration C_0 ergibt sich dann aus $C_0 = M_C / (M_{\text{H}_2\text{O}} + M_C)$. Die Konzentrationen von T und S in der Ausgangssubstanz sind unbekannt, jedoch konstant. Daraus folgen die Proportionalitäten $T_0 \propto C_0$ und $S_0 \propto C_0$ sowie das konstante Konzentrationverhältnis $\frac{T_0}{S_0} = \text{const}$. Aufgrund dieser Relationen kann mit diesem System trotz der unbekanntenen Einzelkonzentrationen gearbeitet werden.

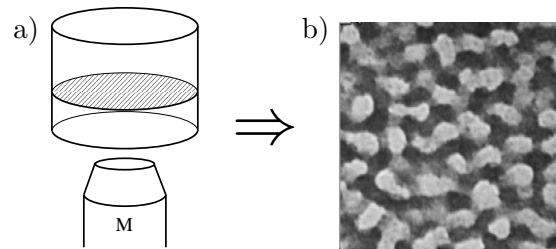


Abbildung 2.4.1: a) Schema des experimentellen Aufbaus zur Beobachtung der Strukturen mit dem Mikroskop; b) typische Aufnahme einer Wabenstruktur (Tensid/Glycerin System), höhere Tensidkonzentrationen sind dunkler.

Die Mischung (T und S in H_2O) wird mittels eines Infusors (Precidor Basel; Infors HT 5003) von einem Vorratsbehälter durch einen Schlauch in eine Pasteurpipette transportiert. Die Verwendung eines Infusors soll eine möglichst gleichmäßige und kontrollierbare Injektionsgeschwindigkeit sicherstellen. Die Pipette ist über einen Ausleger an einem Stativ befestigt. Der Ausleger ist durch Mikrometerschrauben beweglich. Diese Konstruktion soll eine möglichst ruhige Bewegung der Pasteurpipette ermöglichen. Damit sollen die durch die Bewegung der Pipette in und aus dem Wasser verursachten Strömungen minimiert werden. Durch die Pipette wird die Mischung am Boden eines mit Wasser gefüllten Gefäßes injiziert. Das Wasser in dem Gefäß wird vor dem eigentlich Versuch eingefüllt, anschließend wird das Gefäß abgedeckt und solange gewartet ($\mathcal{O}(5\text{min})$), bis durch das Einfüllen entstandenen Strömungen abgeklungen sind. Die (durchsichtige) Abdeckung soll sicherstellen, daß im Laufe des Versuches keine durch Luftströmungen verursachten Wasserströmungen entstehen². Zur Durchführung des eigentlichen Versuchs wird die Abdeckung entfernt, die Pipette wird mittels des beweglichen Stativauslegers in das Wasser bewegt und der Infusor wird für eine Zeitdauer T_{inj} gestartet. Anschließend wird die Pipette aus dem Wasser entfernt und das Gefäß wird wieder abgedeckt.

Je nach experimenteller Zielsetzung werden unterschiedliche Aufbauten und Aufnahmetechniken verwendet. Zur Bestimmung der Wellenlänge und Wachstumszeit wird ein zylinderförmiges Gefäß ($\varnothing = 20$ mm, Höhe 14 mm) mit einem gläsernen Boden verwendet. Die im Vergleich zu anderen Versuchsaufbauten geringe Größe soll den Einfluß der Ausbreitung der Mischung am Boden des Gefäßes verringern. Die Mischung wird während eines Zeitraums von $T_{inj} = 20.0 \pm 0.3$ s injiziert; mit der zuvor gemessenen Injektionsgeschwindigkeit ergibt sich daraus ein injiziertes Volumen von $50.0 \pm 0.8 \mu\text{l}$. Der Fehler des Injektionszeitraums ergibt sich aus der manuellen Ein- und Ausschalten des Infusors, eine Automation ist bei diesem Gerät technisch nicht möglich. Das injizierte Volumen hat in dieser Gefäßgeometrie eine Höhe von 0.159 ± 0.024 mm. Dieser Versuchsaufbau wird von oben beleuchtet, die Beobachtung erfolgte

²Dieser Punkt mag auf den ersten Blick übertrieben klingen, mit einem Mikroskop konnte jedoch bei einer Versuchsdurchführung ohne Abdeckung eine Wasserströmung $\mathcal{O}(0.01$ mm/s) trotz ausgeschalteter Raumlüftung beobachtet werden. Diese wurde durch den Lüfter einer 1 m entfernten Beleuchtungsquelle verursacht.

von unten mittels eines Umkehrmikroskopes (Olympus CK2). Aufgrund dieser Beleuchtung erscheint eine höhere Tensidkonzentration dunkler, da die Tensidmizellen das Licht streuen. Das Glycerin zeigt keine beobachtbare Absorption. Parallel dazu wird die Beobachtung mittels einer an das Mikroskop angeschlossenen CCD Kamera (Pieper FK 7512-IQ) aufgenommen und mit einem Videorekorder (Mitsubishi HS-5424 EA) gespeichert. Alternativ kann der Versuch mit einem angeschlossenen Monitor (VT VMM 12) beobachtet werden. Anschließend wird der aufgenommene Versuchsaufzeichnung per Bildbearbeitungskarte (Matrox Comet) digitalisiert und im Computer weiter ausgewertet. Der schematische Ablauf dieser Vorgehensweise ist in Abb. 2.4.1 dargestellt.

Zur Untersuchung des Einflusses externer Scherströmungen wird ein rechteckiges Gefäß mit den Maßen von $75 \times 25 \times 25 \text{ mm}^3$ verwendet. Die große Länge soll eine möglichst gleichmäßige globale Strömung ermöglichen. Die externe Strömung wird durch den gleichzeitigen Zu- und Abfluß des Wassers in der Höhe H an den Enden des Gefäßes erzeugt (siehe Abb. 2.4.2). Die Messung der Strömung in diesem Aufbau wird an späterer Stelle beschrieben. Da Zu- und Abfluß des Wassers durch einen Kreislauf miteinander verbunden sind, ist ein konstantes Volumen in dem Gefäß gewährleistet. Dieser Kreislauf wird durch eine Peristaltikpumpe (Ismatec Reglo Analog 4/8) angetrieben. 5 Minuten vor der eigentlichen Versuchsdurchführung wird der Kreislauf eingeschaltet. Die Injektion wird wie im vorherigen Fall durchgeführt, ebenso wie die Beobachtung und Aufzeichnung des Versuches. Die Beobachtung wird $\approx 5 \text{ mm}$ in Stromrichtung versetzt vom Mischungs-Injektionspunkt durchgeführt. Durch die Wahl des Beobachtungspunktes soll ein möglichst langer Beobachtungszeitraum erreicht werden, da die Strömung die gravitationsgetriebene Ausbreitung der Mischung in Strömungsrichtung verzerrt und die Mischung nach einer gewissen Zeit aus dem Beobachtungsbereich getrieben wird. Mit den verwendeten Strömungsgeschwindigkeiten und Meßzeiträumen tritt dieser Fall jedoch nicht ein. Schematisch ist dieser Aufbau in Abb. 2.4.2 dargestellt.

Dieser Aufbau hat den Nachteil, daß die horizontale Ausbreitung der Mischung innerhalb des Beobachtungszeitraums nicht durch eine seitliche Begrenzung beendet wird. Somit nimmt die Höhe der Mischung (unter Vernachlässigung von Diffusion) kontinuierlich ab und die Strömungsgeschwindigkeit an der Grenzschicht zwischen Mischung und Wasser ist zeitlich nicht konstant.

Desweiteren werden Versuche mit einer selbstinduzierten Scherströmung durchgeführt. Dazu wurde ein Petrischale mit einem Durchmesser von 7 cm verwendet. Aufgrund der Größe diese Gefäße erreicht die gravitationsgetriebene Ausbreitung des Mischungsvolumens erst zu einem wesentlich späteren Zeitpunkt als im ersten Versuchsaufbau den Rand des Gefäßes. Diese Experimente werden mit dem vorher beschriebenen Aufbau untersucht. Weiterhin wird zur Beobachtung eine CCD-Kamera (Pieper FK 7512-IQ) mit Makroobjektiv ($18 - 108 \text{ mm}$) verwendet, welche ca 30 cm oberhalb des Gefäßes angebracht ist. Eine Gegenlichtbeleuchtung wie in den vorherigen Fällen erwies sich als zu kontrastschwach, deutlichere Resultate werden

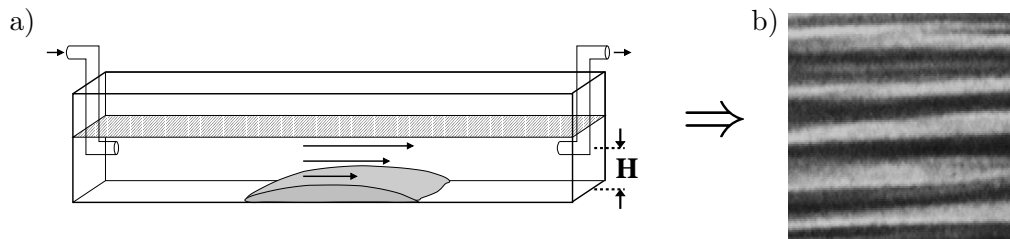


Abbildung 2.4.2: a) Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus mit einer externen Scherströmung; b) daraus resultierende Streifenstruktur (Tensid/Glycerin System), die Strömung verläuft in x -Richtung von links nach rechts, Bildgröße 2×2 mm.

durch eine seitliche Beleuchtung erzielt. Aufgrund der Lichtstreuung an den Tensidmizellen sind somit höhere Tensidkonzentration heller, demzufolge wird ein dunkler Hintergrund bei den Versuchen verwendet.

2.5 Auswertungsmethoden

In diesem Abschnitt wird die zur Auswertung der experimentellen Aufnahmen und Simulationen gleichermaßen verwendete Methode vorgestellt.

Simulationsbilder in der Aufsicht zu unterschiedlichen Zeiten sind in Abb. 2.5.1.a) dargestellt. Zur Darstellung wird die Konzentration der destabilisierenden Substanz S entlang der z -Achse summiert. Eine höhere Konzentration ist dunkler dargestellt. Da in späteren Simulationen unterschiedliche Konzentrationen S_0 verwendet werden, sind die Graustufen der Abbildungen bezüglich S_0 normiert. Diese Darstellungsform wird im Folgenden für alle Abbildungen dieser Art gewählt.

Anhand der Bilder ist zu erkennen, daß die Strukturen untereinander keine räumlich ausgezeichnete Orientierung haben. Desweiteren nimmt im Laufe der Zeit die Deutlichkeit und die Wellenlänge der Strukturen zu. Diese Beobachtungen können durch eine Betrachtung dieser Strukturen im Frequenzraum mittels einer zweidimensionalen Fourierentwicklung deutlicher dargestellt werden. Die Fourierentwicklung geschieht mittels einer Fast Fourier Transformation (FFT), wobei der sogenannte Winograd Algorithmus [33] verwendet wird. Dieser hat den Vorteil, nicht auf eine bestimmte Anzahl von Punkten festgelegt zu sein. Die Grauwerte der Darstellung der 2D-FFT (siehe Abb. 2.5.1.b)) sind der maximalen Amplitude der jeweiligen 2D-FFT angepaßt, somit ist die absolute Größe der Amplituden anhand der Abbildung nicht zu erkennen. Diese Darstellung wird im Folgenden für alle Abbildungen dieser Art verwendet. Im Frequenzraum (siehe Abb. 2.5.1.b)) ergeben die wabenförmigen Strukturen eine ringförmige Verteilung. Die fehlende Orientierung der Strukturen führt zu einer Winkelunabhängigkeit dieser Verteilung. Die zunehmende Deutlichkeit führt zu einer geringeren Varianz der Breite der ringförmigen Verteilung und zu einer Erhöhung der Amplitude im Frequenzraum.

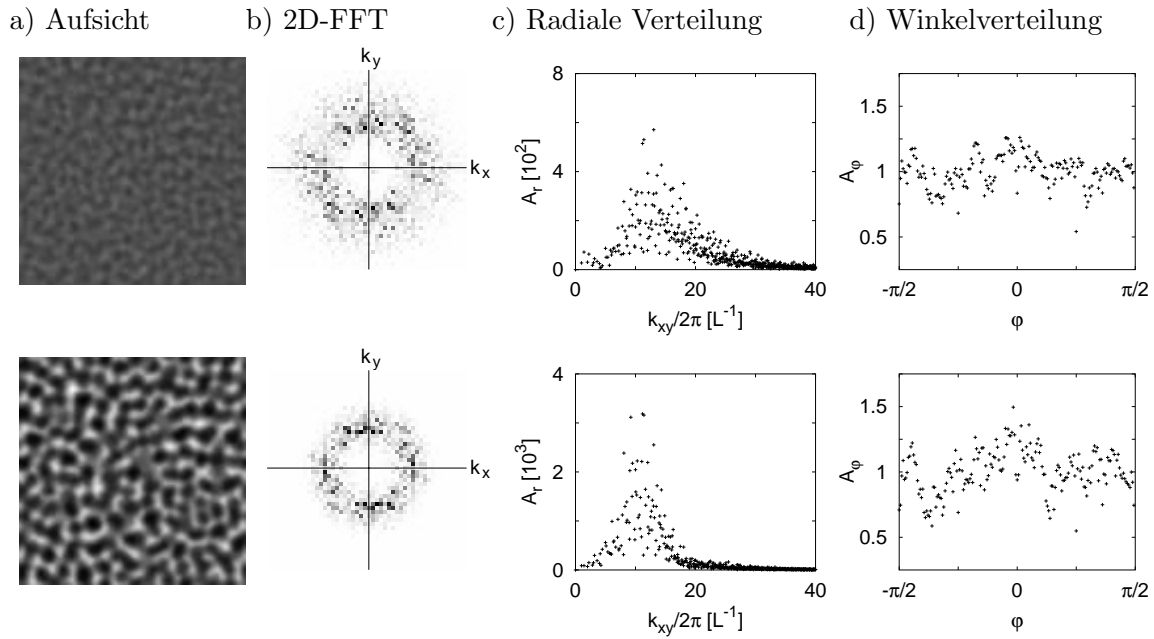


Abbildung 2.5.1: a) Aufsichten einer Simulation zu zwei unterschiedliche Zeiten; b) daraus resultierende 2D-FFT; sowie in c) und d) die Darstellung der Amplituden der FFT in Polarkoordinaten. Die jeweilige Amplitude ist in Abhängigkeit von dem Wellenzahlvektor $k_{xy} \equiv \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ (in Einheiten von L^{-1} , L sei die Kantenlänge des Systems) sowie dem Winkel φ dargestellt; φ ist von der positiven k_x -Achse ausgehend gegen den Uhrzeigersinn definiert.

Aufgrund der ringförmigen Struktur der FFT werden die Ergebnisse in Polarkoordinaten transformiert, d. h. in Radial- und Axialteil aufgespalten. Dies ist in Abb. 2.5.1.c) und d) dargestellt. Da der Radialteil die Amplituden im Frequenzraum beschreibt und der Axialteil nur die Winkelabhängigkeit verdeutlichen soll, werden die Amplituden des Axialteils derart normiert, daß der Mittelwert der axialen Amplituden eins ergibt.

Die zunehmende Deutlichkeit der Strukturen äußert sich in dem starken Anstieg der Amplitude und in der abnehmenden Breite der Verteilung in Abb. 2.5.1.c). Die zunehmende Wellenlänge bewirkt die Verschiebung dieser Verteilung. Die fehlende Orientierung der Strukturen ist in der nahezu gleichförmigen Winkelverteilung (siehe Abb. 2.5.1.d)) zu erkennen. Eine Quantifizierung dieser Verteilung wird an späterer Stelle durchgeführt.

Aufgrund der starken Schwankungen in den radialen Amplituden und der Breite der Verteilung wird in den später folgenden Simulationen mit der Summe der Amplituden gearbeitet, summiert wird hierbei über alle Amplituden. Da in den späteren Untersuchungen unterschiedlichen Konzentrationen verwendet werden, wird dieser Wert durch die jeweilige Konzentration S_0 geteilt. Diese Größe wird durch eine konstante Zahl mit den gleichen Einheiten geteilt und ist somit im Folgenden dimensionslos. Dies ist unproblematisch, da in den späteren Untersuchungen nur das Verhältnis zweier Amplituden von Interesse ist. Diese Größe wird als spektrale Amplitude A bezeichnet.

Der mit den jeweiligen Amplituden gewichtete Mittelwert der Wellenzahlvektoren ergibt den mittleren Wellenzahlvektor \bar{k}_{xy} , aus dem sich die mittlere Wellenlänge $\bar{\lambda}$ ergibt. Diese wird im Folgenden einfach als Wellenlänge λ bezeichnet.

Die Aufteilung der Fouriertransformierten in einen radialen und einen axialen Anteil spiegelt die Gliederung dieser Arbeit in Wellenlängen und Form der Strukturen wieder.

3 – Wellenlänge der Strukturen

Als Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit soll in diesem Kapitel die Wellenlänge der durch doppelt-diffusive Konvektion gebildeten Strukturen bestimmt werden. Die Wellenlänge wurde als Untersuchungsgegenstand gewählt, da diese einfach zu beobachten ist und die Strukturen deutlich charakterisiert. Desweiteren wurden auf diese Gebiet nur wenige Untersuchungen angestellt, so ist z. B. nur eine Untersuchung der Wellenlänge in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten bekannt [20]. Dieser Gradient wurde um einen Faktor 5 variiert; dies führte zu einer Veränderung der Wellenlänge um einen Faktor ≈ 1.4 . Die experimentelle Untersuchung der Wellenlängen wird in dieser Arbeit mit dem schon diskutierten Tensid/Glyzerin System durchgeführt, welches eine Variation der Konzentrationen um einen Faktor 40 erlaubt. Die Bestimmung der Wellenlänge geschieht dabei aufgrund der schon erwähnten experimentellen Schwierigkeiten nicht in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten, sondern in Abhängigkeit von der anfänglichen Konzentration. Dies erfordert eine Erweiterung der bisherigen theoretischen Beschreibung.

Ausgehend von der bisherigen Formel für die Wellenlänge λ in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten T_z wird eine Formel zur Bestimmung der Wellenlänge in Abhängigkeit von der anfänglichen Konzentration T_0 hergeleitet. Diese spiegelt die experimentellen Gegebenheiten besser wider. Durch diese Herleitung wird als eine weitere Quantifizierungsgröße die Wachstumszeit T_{em} eingeführt.

Die theoretischen Vorhersagen werden in dem darauf folgenden Kapitel mit Ergebnissen verschiedener Simulationen detailliert überprüft. Insbesondere Simulationen bieten sich hierzu an, da beliebige Größen problemlos bestimmt werden können.

Weiterhin werden anhand realer Experimente anschließend die theoretischen Vorhersagen verifiziert. Dies zeigt auch die Praxistauglichkeit der theoretischen Formel.

Abschließend werden die experimentellen Ergebnisse mit denen der bisherigen Simulationen verglichen. Hierbei wird sich die Notwendigkeit von weiteren, realitätsgetreueren Simulationen ergeben.

3.1 Theoretische Überlegungen

Die Wellenlänge λ und Wachstumsrate Λ wurden bisher (siehe Gl. 2.1.16 – 2.1.19, Seite 13) in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten T_z ausgedrückt. Weiterhin wurden in der Herleitung dieser Formeln räumlich und zeitlich konstante Gradienten angenommen. Im

Folgendes soll nun versucht werden diese Beschränkung zu umgehen, indem eine zeitabhängige Beschreibung des Systems erfolgt.

Die Zeitentwicklung der Strukturen ist durch Gl. 2.1.11 (Seite 11) gegeben. Im Laufe der Zeit entwickelt sich die zuvor eingeführte spektrale Amplitude der Strukturen $A(t)$ also gemäß folgender Gleichung (siehe auch [37]):

$$A(t) = A_0 \exp(\Lambda \cdot t), \quad (3.1.1)$$

wobei A_0 die Amplitude anfänglich vorhandener Strukturen ist.

Variationen in den anfänglichen Konzentrationen T_0 führen zu Änderungen in Konzentrationsgradienten, d.h. $T_z = T_z(T_0)$; dies beeinflusst die Wellenlänge. Damit stößt Gleichung für die Wellenlänge (Gl. (2.1.17) auf Seite 13) in der praktischen Anwendung schnell an ihre Grenzen, da der Konzentrationsgradient T_z experimentell nicht einfach zu bestimmen ist und sich zudem noch zeitlich verändert. Aus diesem Grund wird im Folgenden die Zeitabhängigkeit des Konzentrationsgradienten berücksichtigt:

$$T_z = T_z(T_0, t)$$

mit der anfänglichen Konzentration T_0 als externem Parameter. Durch die Zeitabhängigkeit des Gradienten sind jetzt nun sowohl die Wellenlänge als auch die Wachstumsrate zeitabhängig. Dies ändert den zeitlichen Verlauf des Wachstums der Strukturen:

$$A(t) = A_0 \exp\left(\int_0^t \Lambda(t') dt'\right) \quad (3.1.2)$$

Dieser Ansatz beruht auf der Voraussetzung, daß Gleichungen 2.1.10 (Seite 11), die der doppelt-diffusiven Konvektion zugrundeliegen, das System nicht nur in der Nähe des Ausgangszustands beschreiben, sondern auch für ein System mit deutlich ausgebildeten Strukturen gültig sind [3, 39].

Es wird nun davon ausgegangen, daß die Bestimmung der Wellenlänge durchgeführt wird, sobald die Struktur den erforderlichen Kontrast, d. h. Amplitude $A(t) = A_{crit}$ hat. Unter der Voraussetzung, daß zu Beginn A_0 für verschiedene Messungen den selben Wert hat, bedeutet dies, daß anfängliche vorhandene Störungen sich um einen beliebigen, jedoch konstanten Faktor vergrößert haben:

$$A(T_{em}) \stackrel{!}{=} A_{crit} \stackrel{!}{=} const. \quad (3.1.3)$$

T_{em} sei der Dauer vom Beginn des Experimentes bis zur Bestimmung der Wellenlänge. Da T_{em} durch die Wachstumsrate Λ vom Konzentrationsgradienten T_z und damit von der Konzentration T_0 abhängig ist, hat man nun die neue Meßgröße

$$T_{em}(T_0)$$

Desweiteren wird angenommen, daß die Wellenlänge nur durch den jeweiligen vorhandenen Gradienten (und nicht etwa durch vorhergehende Gradienten) des Systems bestimmt ist:

$$\lambda(t, T_0)$$

Diese Annahme wird an späteren Stelle diskutiert.

Da die Messung der Wellenlänge zum Zeitpunkt T_{em} erfolgt, erhält man:

$$\lambda(T_0)$$

Insgesamt wird also zum einen die bisherige Variable T_z durch die neue Variable T_0 ersetzt und desweiteren eine neue Meßgröße T_{em} eingeführt.

In den folgenden Betrachtungen wird ein diffusives Verhalten des Konzentrationsgradienten angenommen. Dies kann als rein hypothetische Annahme betrachtet werden, zumal bei dieser Annahme keine Koppelung zwischen den Fingern und dem Gradienten T_z berücksichtigt wird und desweiteren die zugrundeliegenden Formeln für die Wellenlänge und Wachstumsrate für einen räumlich und zeitlich konstanten Gradienten hergeleitet wurden. Darüberhinaus sprechen experimentelle Befunde für die Annahme eines durch Diffusion gebildeten Gradienten T_z [47, 20]. Als Hauptargument für diese Annahme sprechen jedoch die Ergebnisse der numerischen Lösung des Gleichungssystems 2.2.1 (Seite 15). Dieses Gleichungssystem war der Ausgangspunkt zur Herleitung des linearen Gleichungssystems und darauf aufbauend der Formeln für die Wellenlänge und Wachstumsrate. Der Diskussion der numerischen Ergebnisse soll an dieser Stelle nicht vorgegriffen werden und erfolgt an späterer Stelle¹.

3.1.1 Stufenförmige Anfangsbedingung

Zunächst soll der Fall einer in der xy -Ebene homogenen, in z -Richtung stufenförmige Anfangsbedingung betrachtet werden. Die Konzentrationen haben zu Beginn folgende Verteilung:

$$T(x, y, z, t = 0) = \begin{cases} T_0 & \text{wenn } z < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{sowie} \quad S(x, y, z, t = 0) = \begin{cases} S_0 & \text{wenn } z < 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Der Einfluß der Ränder wird vernachlässigt, d.h. das System habe eine unendliche Ausdehnung. Aufgrund der oben angeführten Überlegungen wird die zeitliche Entwicklung dieses Konzentrationsprofils nur aufgrund von Diffusion betrachtet.

Die Konzentration ist aufgrund der anfängliche Verteilung räumlich nur von z abhängig, d. h. $T(z, t)$. Die zeitliche Entwicklung von $T(z, t)$ ergibt sich aus dem Integral über die anfänglichen Konzentrationen (siehe [19], §51):

$$T(z, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_T t}} \lim_{h \rightarrow \infty} \int_{-h}^0 T_0 \exp\left(-\frac{(z - \zeta)^2}{4D_T t}\right) d\zeta$$

¹Zur Bestätigung siehe Abbildung 3.2.6 auf Seite 45.

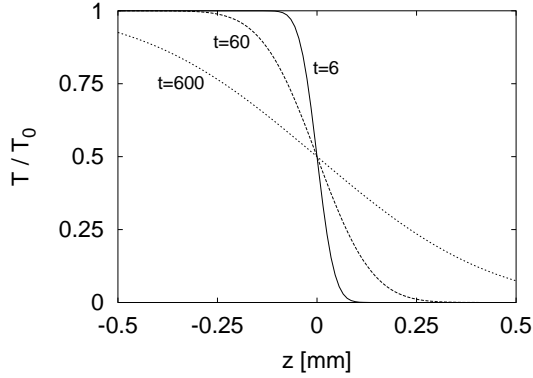


Abbildung 3.1.1: Die Konzentration $T(z,t)$ nach Gl. 3.1.4 für eine anfänglich stufenförmige Verteilung zu unterschiedlichen Zeiten, $D_T = 1 \cdot 10^{-10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

Die Lösung dieses Integrals ergibt im Limes $h \rightarrow \infty$ (siehe [15] oder [19], §52):

$$T(z, t) = \frac{T_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{z}{2\sqrt{D_T t}} \right) \quad (3.1.4)$$

mit der Komplementen der Fehlerfunktion (siehe z.B. [19], §52):

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{x}} \int_0^x \exp(-u^2) du \quad (3.1.5)$$

Die Fehlerfunktion hat die Eigenschaften:

$$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x), \quad \operatorname{erf}(\infty) = 1, \quad \operatorname{erf}(0) = 0 \quad (3.1.6)$$

Die Konzentration $T(z, t)$ ist in Abb. 3.1.1 dargestellt; es ist ein zeitlich wachsender Einfluß der Diffusion auf Konzentrationsprofil zu erkennen.

Aus $T(z, t)$ (Gl. 3.1.4) resultiert der Konzentrationsgradient $T_z(z, t) \equiv \frac{\partial}{\partial z} T(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned} T_z(z, t) &= \frac{T_0}{2\sqrt{\pi D_T t}} \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{d}{dz} \int_{-h}^0 \exp\left(-\frac{(z-\zeta)^2}{4D_T t}\right) d\zeta \\ &= \frac{-T_0}{2\sqrt{\pi D_T t}} \lim_{h \rightarrow \infty} \exp\left(-\frac{(z-\zeta)^2}{4D_T t}\right) \Big|_{-h}^0 = \frac{-T_0}{2\sqrt{\pi D_T t}} \exp\left(\frac{-z^2}{4D_T t}\right) \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

In [15] wurde dieser Ansatz verwendet, um unter Verwendung des Maximums des Gradienten (bei $z = 0$):

$$T_{z, \text{Max}}(z, t) = \frac{-T_0}{2\sqrt{\pi D_T t}} \quad (3.1.8)$$

die Bedingung zur Entstehung der doppelt-diffusiven Instabilität (Gl. 2.1.14 auf S. 12) auf ein anfänglich stufenförmiges Konzentrationsprofil zu erweitern:

$$R_\rho \equiv -\frac{\alpha_T T_0}{\alpha_S S_0} < \tau^{\frac{3}{2}} \quad (3.1.9)$$

Es wurde der maximale Gradient verwendet, da an dieser Stelle die Bedingung für doppelt-diffusive Konvektion zuerst erfüllt ist und dort die maximale Wachstumsrate auftritt.

Im folgenden soll nun diese Idee über den Beginn der Instabilität hinaus verwendet werden. Der Einfluß der doppelt-diffusiven Konvektion auf das Konzentrationsprofil wird als vernachlässigbar angenommen, und es wird weiterhin nur von einem diffusiven Einfluß auf das Konzentrationsprofil ausgegangen. Diese Annahme basiert auf den Überlegungen auf Seite 33. Der Bereich der doppelt-diffusiven Instabilität breitet sich durch das diffusive Wachstum der Grenzschicht in z -Richtung aus. Weiterhin wechselwirken unterschiedliche Höhen mit daraus folgenden unterschiedlichen Gradienten durch Strömung in z -Richtung miteinander. Aufgrund dieser Überlegungen wird mit dem mittleren Gradienten des Bereiches gearbeitet, indem die Bedingung für die doppelt-diffusive Finger-Instabilität erfüllt ist.

Den mittleren Gradienten \bar{T}_z kann man folgendermaßen abschätzen: Die Höhe der Grenzschicht Δh wächst durch Diffusion[19]:

$$\Delta h(t) \propto t^{\frac{1}{2}}$$

Dieses diffusive Wachstum der Grenzschicht wurde in einem doppelt-diffusiven System experimentell nachgewiesen [54]. Aufgrund der Vernachlässigung der Ränder des Systems ist die Konzentration oberhalb der Grenzschicht $T = 0$ und unterhalb $T = T_0$; demzufolge erhält man eine zeitlich konstanten Konzentrationsunterschied:

$$\Delta T(t) = T_0 = \text{const.} \quad (3.1.10)$$

Daraus ergibt sich dann ein mittlerer Gradient:

$$\bar{T}_z(t) \approx \frac{\Delta T(t)}{\Delta h(t)} \propto T_0 t^{-\frac{1}{2}} \quad (3.1.11)$$

Der mittlere Gradient \bar{T}_z läßt sich auch analytisch bestimmen. Hierzu wird aufgrund obiger Überlegungen über den Bereich gemittelt, in dem die Bedingung für doppelt-diffusive Konvektion erfüllt ist. Da die hier betrachteten Gradienten höhenabhängig sind, wird die bisherige Bedingung (Gl. 2.1.14 auf S. 12) nun in einer höhenabhängigen Form betrachtet:

$$\tau > \frac{\alpha_T T_z(z)}{-\alpha_S S_z(z)} \quad (3.1.12)$$

Durch Einsetzen der Gradienten (Gl. 3.1.7 und analog für $S_z(z, t)$) erhält man:

$$\tau^{\frac{3}{2}} \frac{-\alpha_S S_0}{\alpha_T T_0} > \exp\left(\frac{z^2}{4t} \left(\frac{1}{D_S} - \frac{1}{D_T}\right)\right)$$

Daraus erhält man die Grenze z_{dd} des Bereiches, in dem die Bedingung für doppelt-diffusive Konvektion erfüllt ist:

$$\begin{aligned} z_{dd} &= \left(4t \frac{D_S D_T}{D_T - D_S} \log\left(\tau^{\frac{3}{2}} \frac{-\alpha_S S_0}{\alpha_T T_0}\right)\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\equiv 2\sqrt{D_T t} C_{dd} \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

Hierbei wird die positive Lösung der Wurzel als z_{dd} gewählt, die negative gibt die untere Grenze des doppelt-diffusiven Bereiches an. Die Größe

$$C_{dd} = \left(\frac{D_S}{D_T - D_S} \log \left(\frac{\tau^{\frac{3}{2}}}{R_\rho} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.1.14)$$

hängt nur von R_ρ ab und ist somit unter der Bedingung $R_\rho = const$ eine Konstante. Durch die Bedingung für die doppelt-diffusive Instabilität (Gl. 3.1.9) ist sichergestellt, daß das Argument der Wurzel stets positiv ist. Mit der Grenze z_{dd} des doppelt-diffusiven Bereiches ergibt sich der mittlere Gradient hierfür:

$$\bar{T}_z(t) = \frac{T(z_{dd}, t) - T(-z_{dd}, t)}{2z_{dd}}$$

$T(z, t)$ (siehe Gl. 3.1.4) wird durch die Komplemente der Fehlerfunktion (Gl. 3.1.5) beschrieben. Unter Ausnutzung von Gl. 3.1.6 ergibt dies für den mittleren Gradienten:

$$\bar{T}_z(t) = \frac{-T_0}{2z_{dd}} \operatorname{erf} \left(\frac{z_{dd}}{2\sqrt{D_T t}} \right)$$

Mit z_{dd} (Gl. 3.1.13) erhält man somit

$$\bar{T}_z(t) = \frac{-T_0}{4\sqrt{D_T t} C_{dd}} \operatorname{erf}(C_{dd}) \quad (3.1.15)$$

Der mittlere Gradient ist somit bei einer Variation von T_0 oder t proportional zu dem maximalen Gradienten (Gl. 3.1.11):

$$\frac{T_{z,Max}(t)}{\bar{T}_z(t)} = \frac{2 C_{dd}}{\operatorname{erf}(C_{dd})} \quad (3.1.16)$$

Um diese Relation zu verdeutlichen, ist in Abb. 3.1.2 dieser Quotient in Abhängigkeit von R_ρ dargestellt. Über den gesamten Bereich der doppelt-diffusiven Instabilität für ein anfänglich stufenförmiges Konzentrationsprofil ($1 < R_\rho < \tau^{\frac{3}{2}}$) ist nur eine leichte Veränderung von $\frac{T_{z,Max}(t)}{\bar{T}_z(t)}$ bei einer Variation von R_ρ zu beobachten.

Setzt man diesen Gradienten (Gl. 3.1.15) in die Wachstumsrate (Gl. 2.1.18 auf S. 13), und dies in die zeitliche Entwicklung der spektralen Amplitude (Gl. 3.1.2, S. 32) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} A(t) &= A_0 \exp \left(\int_0^t \Lambda(t') dt' \right) = A_0 \exp \left(T_0^{\frac{1}{2}} \int_0^t t'^{-\frac{1}{4}} dt' \cdot \left(\frac{g\alpha_T}{D_T} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\operatorname{erf}(C_{dd}) G}{4C_{dd}} \right) \\ &= A_0 \exp \left(T_0^{\frac{1}{2}} t^{\frac{3}{4}} \cdot \left(\frac{g\alpha_T}{D_T} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\operatorname{erf}(C_{dd}) G}{3C_{dd}} \right) \stackrel{!}{=} A_{crit} \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

Die Größe A_{crit} ist diejenige Amplitude, bei der die Messung durchgeführt wird. Diese Größe wurde in Gl. 3.1.3 (Seite 32) motiviert.

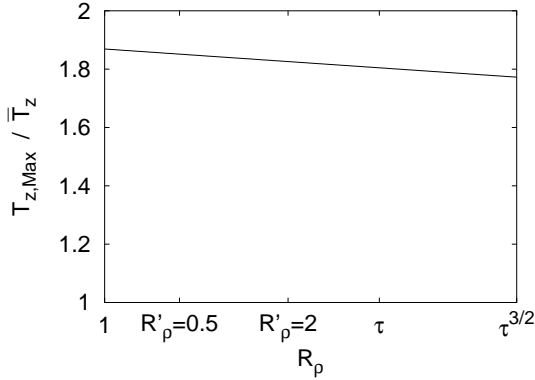


Abbildung 3.1.2: Der Quotient der Konzentrationsgradienten $\frac{T_{z,Max}(t)}{\bar{T}_z(t)} = \frac{2C_{dd}(R_\rho)}{\text{erf}(C_{dd}(R_\rho))}$ in Abhängigkeit vom Stabilitätsverhältnis R_ρ . Dargestellt sind desweiteren die Instabilitätsgrenzen $\tau = \frac{D_T}{D_S} \approx 33$ und $\tau^{3/2} \approx 192$ sowie die später verwendeten Parameter $R'_\rho = 2$ und $R'_\rho = \frac{1}{2}$, $R_\rho = -\frac{\alpha_T}{\alpha_S} \cdot R'_\rho = 5.2 \cdot R'_\rho$.

Für den Meßzeitpunkt $t = T_{em}$ ergibt sich unter der Voraussetzung $R_\rho = const$ somit:

$$T_{em} = T_0^{-\frac{2}{3}} \left(\left(\frac{D_T}{g\alpha_T} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{3C_{dd}}{\text{erf}(C_{dd}) G} \right)^{\frac{4}{3}} \ln \left(\frac{A_{crit}}{A_0} \right) \quad (3.1.18)$$

Da experimentell sowohl A_{crit} wie auch A_0 prinzipiell nicht bestimmt sind, wird im Folgenden nur noch die Konzentrationsabhängigkeit betrachtet. Aufgrund der Proportionalität zwischen dem maximalen und dem mittleren Gradienten folgt daraus, daß beide Gradienten im Folgenden zu gleichen Resultaten führen.

Für die Wachstumszeit erhält man somit:

$$T_{em} \propto T_0^{-\frac{2}{3}} \quad (3.1.19)$$

Diese Gleichung beschreibt die Veränderung der Wachstumszeit T_{em} bei einer Variation der anfänglichen Konzentrationen T_0 .

Setzt man den Gradienten \bar{T}_z (ohne Berücksichtigung der Konstanten) in die Formel für die Wellenlänge (siehe Gl. 2.1.17 auf S. 13 oder Gl. 2.1.19 auf S. 13) ein, so erhält man:

$$\lambda \propto T_0^{-\frac{1}{4}} \cdot t^{\frac{1}{8}} \quad (3.1.20)$$

Dies beschreibt die Zunahme der Wellenlänge im Laufe der Zeit, die somit gemäß $\lambda(t) \propto t^{\frac{1}{8}}$ anwächst.

Am Meßzeitpunkt, d. h. $t = T_{em}$, erhält man mit Gl. 3.1.19 somit:

$$\lambda \propto T_0^{-\frac{1}{3}} \quad (3.1.21)$$

Diese Gleichung beschreibt die Veränderung der Wellenlänge λ bei einer Variation der anfänglichen Konzentration T_0 .

3.1.2 Nicht-stufenförmige Anfangsbedingung

In diesem Abschnitt werden einige allgemeine Überlegungen über das Skalenverhalten ausgedehnter, aber nicht stufenförmiger Anfangskonzentrationen angestellt.

Eine anfängliche, nur von einer Raumkoordinate abhängende Verteilung $T(t = 0, z)$ entwickelt sich im Laufe der Zeit nur unter Berücksichtigung der eigenen Diffusion [19], §51, gemäß:

$$T(z, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_T t}} \int_{-\infty}^{\infty} T(t = 0, \zeta) \cdot \exp\left(-\frac{(z - \zeta)^2}{4D_T t}\right) d\zeta \quad (3.1.22)$$

Diese Gleichung ist in dieser allgemeinen Form nicht lösbar. Durch konkrete Annahmen über die anfängliche Verteilung kann das Integral unter Umständen gelöst werden. Bei einem weiteren Vorgehen wie im vorherigen Abschnitt ist jedoch nach einer z -Differentiation eine t -Integration dieser Lösung erforderlich. Dies ist im Allgemeinen nicht analytisch durchführbar und wird nicht näher untersucht. Eine numerische Lösung erscheint nicht sonderlich sinnvoll in Anbetracht der Tatsache, daß diese Systeme in späteren Kapitel mit den zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen ausführlich behandelt werden.

Huppert und Manins haben festgestellt (siehe [15]²), daß die in dem vorherigen Kapitel aus der diffusive Verbreitung eines anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofils hergeleiteten Gradienten für hinreichend große Zeiten auf beliebige Anfangsverteilungen angewendet werden können. Aufgrund der Abschätzung des mittleren Gradienten (Gl. 3.1.11 auf Seite 35) ist jedoch erkennbar, daß dies nur dann möglich ist, wenn ein zeitlich konstanter Konzentrationsunterschied (siehe hierzu 3.1.10 auf Seite 35) angenommen werden kann. In den späteren Untersuchungen ist dies nicht der Fall.

²Siehe Fußnote in diesem Artikel auf Seite 319.

3.2 Wellenlängen in der Simulation

In diesem Kapitel soll die Gültigkeit der in dem vorherigen theoretischen Kapitel getroffenen Aussagen anhand von Simulationen überprüft werden. Hierzu wird zunächst der Einfluß des anfänglichen Rauschens auf das Verhalten der Observablen untersucht, da dieser Parameter experimentell nicht zugänglich ist. Da die theoretische Annahme eines unendlich ausgedehnten Systems in der Praxis nicht erfüllbar ist, wird als nächstes der Gültigkeitsbereich dieser Annahme und der Einfluß auf die Observablen untersucht. Die theoretischen Überlegungen basieren auf der Annahme einer rein diffusiven Entwicklung des Konzentrationsprofils; dies wird anhand der Simulationen verifiziert. Nach dieser Überprüfung der theoretischen Annahmen werden die theoretischen Aussagen untersucht. Hierzu wird die Untersuchung der Zeit- und Konzentrationsabhängigkeit der theoretischen Aussage (Gl. 3.1.17 auf Seite 36).

- $A(t) = A_0 \cdot \exp(const \cdot T_0^{\frac{1}{2}} t^{\frac{3}{4}})$.

durchgeführt.

Anschließend werden die Hauptaussagen des theoretischen Teils (Gl. 3.1.19 – Gl. 3.1.21) überprüft:

- Die Konzentrationsabhängigkeit der Wachstumszeit $T_{em} \propto T_0^{-\frac{2}{3}}$.
- Die Zeitabhängigkeit der Wellenlänge $\lambda \propto t^{\frac{1}{8}}$.
- Die Konzentrationsabhängigkeit der Wellenlänge $\lambda \propto T_0^{-\frac{1}{3}}$.

Dies wird anhand von Simulation mit einer stufenförmigen Anfangsbedingung durchgeführt. Anschließend werden diese Untersuchungen mit Simulationen mit einem anfänglich linearem Konzentrationsprofil verglichen, um den Einfluß des Konzentrationsprofils zu untersuchen. Abschließend werden diese Ergebnisse noch mit den zugrundeliegenden Relationen (Gl. 2.1.16 und Gl. 2.1.17, Seite 13) verglichen, um mögliche Unterschiede deutlich zu machen.

3.2.1 Stufenförmige Anfangsbedingung

Für alle nun folgenden Simulationen werden in x und y -Richtung periodische Randbedingungen angenommen, um einen Einfluß der Ränder auf das System zu vermeiden. Oben und unten werden ‘no-flux’ Randbedingungen angenommen, somit ist Gesamtmenge an T_0 und S_0 zeitlich konstant. Das simulierte System hat eine Größe von $(1 \times 1 \times 1)$ mm³, die Gitterschrittweite beträgt 10^{-2} mm, die Integrationszeitschritt beträgt $2.5 \cdot 10^{-1}$ s. Anstelle der Konzentration S_0 wird im Folgenden $R'_\rho \equiv \frac{T_0}{S_0}$ angegeben.

Um die theoretischen Vorhersagen des vorherigen Kapitels zu überprüfen, werden nun Simulationen mit einer stufenförmigen Anfangsbedingung durchgeführt. Die Anfangsverteilung in T_0 und S_0 sieht dabei folgendermaßen aus:

$$T(x, y, z) = \begin{cases} T_0 & \text{wenn } z < H_{TS} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad \text{sowie } S(x, y, z) = \begin{cases} S_0 & \text{wenn } z < H_{TS} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.2.1)$$

Diese Anfangsbedingung ist dabei insofern eine Näherung der theoretischen Annahme einer stufenförmigen Konzentrationsverteilung, als daß in der Simulation keine unendliche Ausdehnung realisiert werden kann.

3.2.1.1 Anfängliches Rauschen

Die anfänglichen Werte der Modellvariablen müssen durch ein Rauschen überlagert werden. Ohne ein Rauschen würde das System bei diesen Anfangsbedingungen und einer mathematisch exakten Lösung in seinem ursprünglichen Zustand verbleiben. Dies ist anschaulich auf Seite 4 und theoretisch anhand von Gl. 3.1.1 (Seite 32) ersichtlich. Das anfängliche Rauschen kann nicht dem Experiment entnommen werden. Aus diesem Grund wird der Einfluß dieses Parameters in den Simulationen untersucht.

Ein anfängliches Rauschen kann entweder direkt in den Konzentrationen T_0 , S_0 oder über das Strömungsfeld \vec{v} realisiert werden. Eine Realisation über die Konzentrationen würde bedeuten, daß aufgrund der großen Unterschiede in diesen nur mit einem relativen Rauschen in den Konzentrationen gearbeitet werden kann. Da sich im Folgenden herausstellen wird, daß die anfängliche Rauschamplitude einen nicht zu vernachlässigenden Einfluß auf das System hat, wird diese Umsetzung nicht verwendet. Die Verwendung von Rauschen im anfänglichen Strömungsfeld führt über den Transport (siehe Gl. 2.2.1 auf S. 15) von T und S zu lokalen Inhomogenitäten in den Konzentrationen; diese werden also durch einen physikalischen Prozeß gebildet. Das anfängliche Strömungsfeld klingt aufgrund seines stochastischen Charakters und der inneren Reibung aufgrund von Viskosität schnell ab.

Der Einfluß des anfänglichen Rauschens wird nun durch eine Variation der Amplitude $|\vec{\epsilon}|$ untersucht. Dies bedeutet, daß zu Beginn der Simulation die Strömungsvektoren jedes Gitterpunkts einen zufällig ausgewählten Betrag mit $0 < |\vec{v}(\vec{r}, t = 0)| < |\vec{\epsilon}|$ haben und in individuell zufällig ausgewählte Richtungen zeigen. Alle übrigen Parameter des Systems werden dabei konstant gehalten. Für die folgenden Untersuchungen wird eine anfängliche Höhe von $H_{TS} = 0.5$ mm gewählt, um den zu beiden Seiten der Grenzschicht zur Verfügung stehenden Raum optimal auszunutzen.

In Abbildung 3.2.1 ist das Verhalten der spektralen Amplitude und der Wellenlänge bei einer Variation des anfänglichen Rauschens dargestellt. In der spektralen Amplitude $A(t)$ zeigt sich eine starke Abhängigkeit von der anfänglichen Rauschamplitude, wie man an Abb. 3.2.1.a)

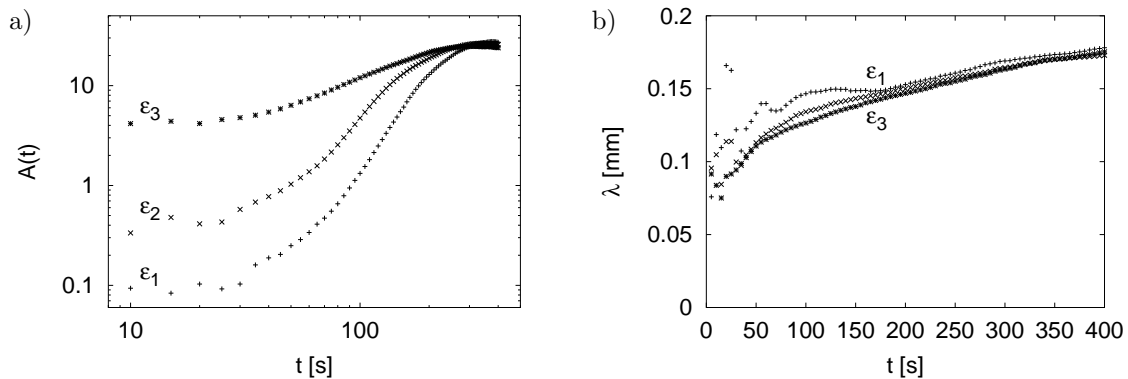


Abbildung 3.2.1: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$, $R'_\rho = 1$, $H_{TS} = 0.5$ mm, unterschiedliche Rauschamplituden $|\bar{\epsilon}|$. ϵ_1 : $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-6}$ m/s, ϵ_2 : $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-5}$ m/s, sowie ϵ_3 : $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s.

erkennen kann. Dies ist auch unmittelbar aus der theoretischen Relation (Gl. 3.1.1 auf S. 3.1.1) ersichtlich, da $A(t) \propto A_0$. Die Wachstumszeit T_{em} , die durch das Erreichen einer vorgegebenen kritischen Amplitude A_{crit} definiert wird, ist somit in Grenzen durch das anfängliche Rauschen einstellbar, da größere Rauschamplituden zu kleineren Wachstumszeiten führen. Da in den folgenden Kapiteln die spektrale Amplitude zur Charakterisierung des Systems verwendet wird, werden alle späteren Simulationen zur Bestimmung der Wachstumszeit und der Wellenlänge mit der gleichen Amplitude des Rauschens initialisiert; ebenso wie die Gitterschrittweite überall gleich gewählt wird. Unabhängig von der anfänglichen Rauschamplitude streben jedoch alle Systeme für $t \gtrsim 200$ s auf die selbe spektrale Amplitude zu, siehe Abb. 3.2.1.a). Die Quantifizierung der zeitlichen Entwicklung der spektralen Amplituden wird an späterer Stelle durchgeführt.

Die Wellenlänge $\lambda(t)$ hingegen ist unabhängig von der Amplitude des anfänglichen Rauschens, wie an Abb. 3.2.1.b) deutlich wird. Theoretisch ist dies unmittelbar einsichtig, da A_0 nicht direkt in dessen Berechnung eingeht.

Die Form der Strukturen hingegen ist abhängig vom anfänglichen Rauschen, wie man an Abb. 3.2.2 erkennt: Regelmäßigere, quadratische Strukturen entstehen bei kleinerem anfänglichen Rauschen (Abb. 3.2.2.a). Die bevorzugte Bildung von quadratischen Strukturen wurde auch experimentell beobachtet (siehe z. B. [48]). Bei größerem Rauschen prägen die anfänglichen

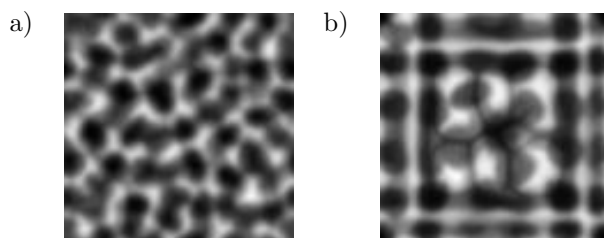


Abbildung 3.2.2: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, $t = 200$ s, Aufsicht. a) $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s, b) $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-6}$ m/s.

Inhomogenitäten die später entstehenden Strukturen, somit entstehen unregelmäßigere und damit den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten ähnlichere Strukturen (siehe z. B. Abb 3.3.1 auf S. 64). Demzufolge wird ab jetzt die Rauschamplitude $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s für weitere Simulationsreihen verwendet, da dies die experimentellen Gegebenheiten offensichtlich besser widerspiegelt. Sofern keine andere Rauschamplitude explizit angegeben ist, wird grundsätzlich dieses $|\bar{\epsilon}|$ verwendet.

3.2.1.2 Höhenabhängigkeit

Die theoretischen Überlegungen basierten auf der Annahme eines unendlichen ausgedehnten Systems (siehe Kap. 3.1.1 auf Seite 33). Dies kann in Simulationen nicht umgesetzt werden. Aus diesem Grund werden nun Simulationen mit unterschiedlichen Höhen der Mischung H_{TS} durchgeführt, da der Einfluß des Randes auf das System bei einem größerem Abstand zu der anfänglichen Mischungshöhe H_{TS} erst später erfolgt. Dies wird anhand von Abb. 3.1.1 (Seite 34) deutlich.

Anhand der Simulationsergebnisse (siehe Abb. 3.2.3) erkennt man, daß sich Systeme mit unterschiedlichen H_{TS} in der spektralen Amplitude $A(t)$ bis zu einem Erreichen einer Sättigung gleich verhalten. Dies tritt ein, sobald die Zwischenräume zwischen den Fingern den unteren Rand des Systems erreicht haben, der das weitere Wachstum begrenzt. Für $H_{TS} = 0.16$ mm ist dies bei $t \approx 140$ s und für $H_{TS} = 0.32$ mm bei $t \approx 200$ s der Fall; dies ist in Abb. 3.2.4 dargestellt. In dieser Abbildung ist weiterhin das von der Grenzschicht ausgehende Wachstum der Finger nach oben und unten zu erkennen. Der Zusammenhang zwischen dem Erreichen des Randes und der Sättigung der spektralen Amplitude ist deutlich erkennbar durch einen Vergleich der Zeitpunkte von Abb. 3.2.4 mit Abb. 3.2.3.a). In dem Sättigungsbereich ist ein geringer Abfall der spektralen Amplitude zu beobachten (siehe Abb. 3.2.3.a) für $H_{TS} = 0.16$ mm). Dies wird durch eine geringe Abnahme der Deutlichkeit der Finger verursacht, nachdem

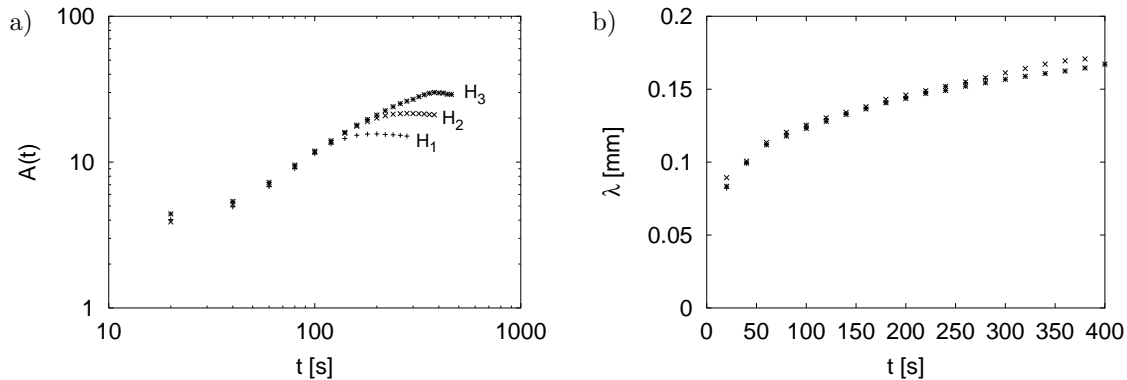


Abbildung 3.2.3: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, unterschiedliche Höhen $H_{TS} = H_1, H_2, H_3$: $H_1 = 0.16$ mm, $H_2 = 0.32$ mm und $H_3 = 0.64$ mm.

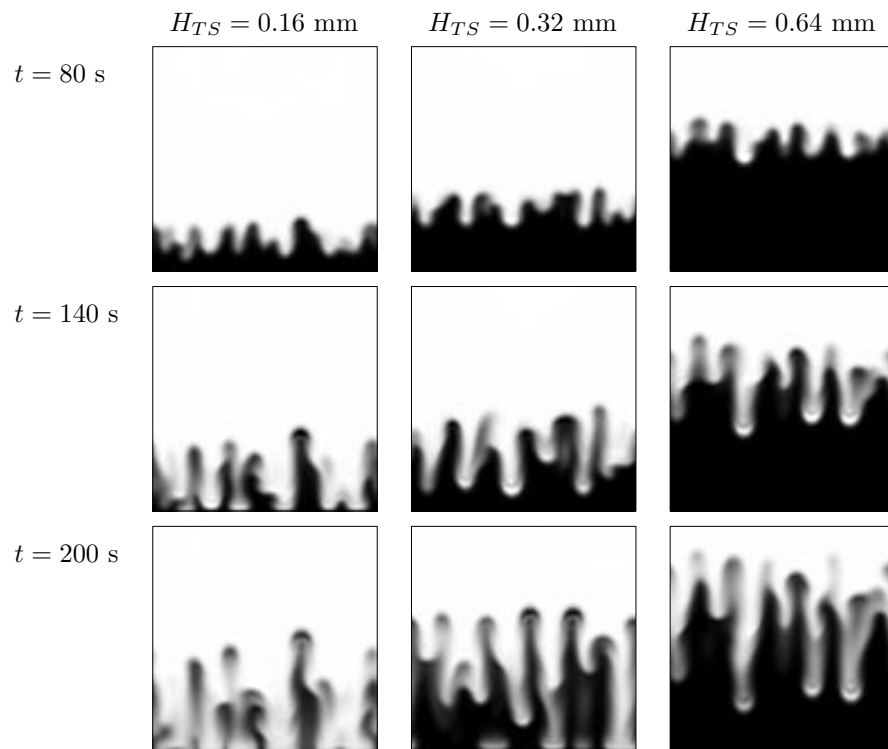


Abbildung 3.2.4: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_p = 1$, senkrechte Schnitte zu unterschiedlichen Zeiten und für unterschiedliche Höhen H_{TS}

die Zwischenräume zwischen den Fingern den Boden des Systems erreicht haben und sich dort seitlich ausbreiten. Dies ist an Abb. 3.2.4 für $H_{TS} = 0.16$ mm bei $t = 200$ s zu erkennen.

In der Wellenlänge $\lambda(t)$ (siehe Abb. 3.2.3.b)) hingegen ist nahezu keine Höhenabhängigkeit festzustellen. Vor dem Erreichen des Randes ist dieses Verhalten unmittelbar einsichtig, da der Rand in diesem Zeitraum noch keinen Einfluß auf das System ausübt. Nach dem Erreichen des Randes fällt der Konzentrationsgradient weiter ab, so daß die Wellenlänge weiter zunimmt. Somit ist der Unterschied in der Wellenlänge in beiden Fällen nahezu vernachlässigbar, wie man an Abb. 3.2.3.b) für $t \gtrsim 300$ s erkennt.

3.2.1.3 Zeitliche Entwicklung

Im Folgenden soll nun die zeitliche Entwicklung des System detailliert untersucht werden. Dabei wird eine Höhe von $H_{TS} = 0.5$ mm verwendet, da sich hierbei die Systeme den längsten Zeitraum ohne Einfluß des Randes entwickeln. Weitere Unterschiede zu Systemen mit anderen Höhen H_{TS} treten nicht auf, wie im vorherigen Kapitel gezeigt wurde.

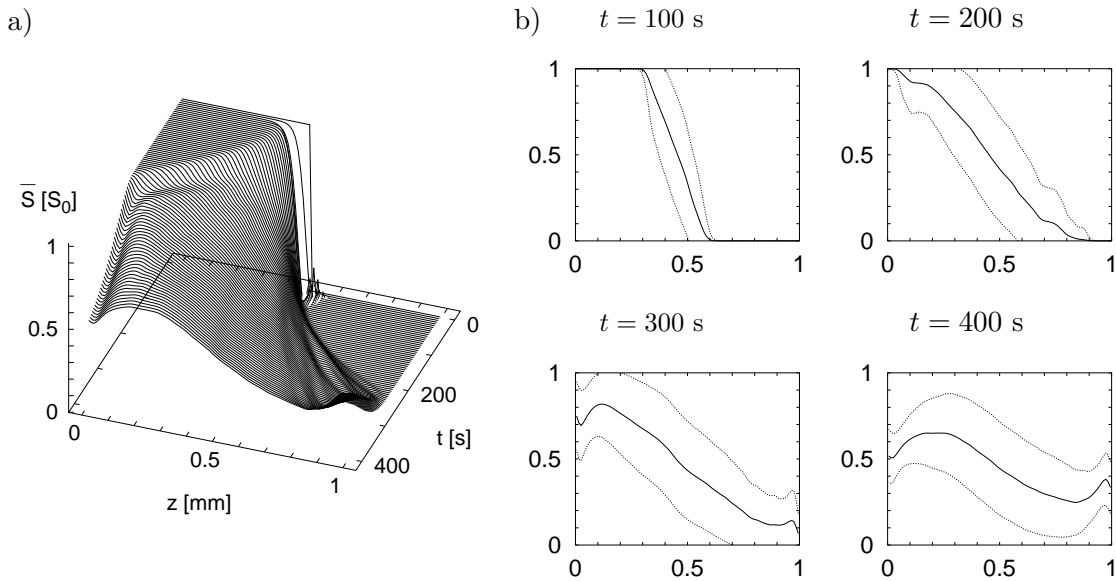


Abbildung 3.2.5: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, $H_{TS} = 0.5$ mm, Zeitliche Entwicklung der horizontal gemittelten Konzentration \bar{S} der destabilisierenden Substanz. a) \bar{S} in Abhängigkeit von z und t ; b) \bar{S} (—) und $\bar{S} \pm \sigma_S$ (···) vs z zu den angegebenen Zeitpunkten.

Zeitliche Entwicklung der mittleren Konzentrationen

In den vorangegangenen Abschnitten zeigt sich ein Wachstum der Finger von der Grenzschicht ausgehend in vertikaler Richtung. Die theoretischen Überlegungen basieren auf der Annahme einer diffusiven Ausbreitung des Konzentrationsprofils T . Dies soll nun anhand der horizontal gemittelten Konzentrationen \bar{S} , \bar{T} und der jeweiligen Standardabweichung σ_T , σ_S dieser Werte untersucht werden.

Die zeitliche Entwicklung der höhenabhängigen Konzentration \bar{S} ist in Abbildung 3.2.5 dargestellt. Ausgehend von der anfänglich stufenförmigen Konzentrationsverteilung ist die Verbreiterung des Übergangsbereiches zwischen den maximalen Konzentrationen zu erkennen. Zum Zeitpunkt $t \approx 200$ s erreicht die Strukturen den unteren Rand des Systems, dies ist an dem Konzentrationsabfall bei $z = 0$ mm zu erkennen. Die Höhenabhängigkeit der Konzentration entspricht offensichtlich nicht einer sich rein diffusiv ausbreitenden Substanz. Im Gegensatz zu einer monoton fallenden Konzentration ist eine komplizierte Struktur erkennbar. Dies ist in Abb. 3.2.5.b) im einzelnen dargestellt. Für $t = 100$ s und 200 s ist ein nahezu linearer Abfall der Konzentration zu beobachten. Dies entspricht dem typischen Konzentrationsprofil der destabilisierenden Substanz und wurde beispielsweise in [20, 46] untersucht. Anhand der großen Varianz der mittleren Konzentration in dem Übergangsbereich ist die Fingerbildung in diesem Bereich ersichtlich. Im Laufe der Zeit fällt der vertikale Konzentrationsgradient weiter ab, der monotone Abfall der Konzentration geht jedoch in einen sinusähnlichen Verlauf über.

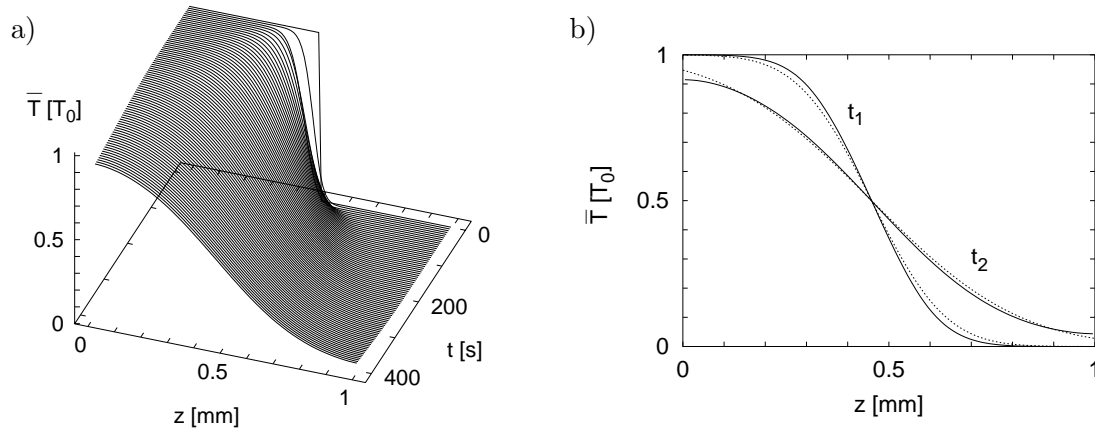


Abbildung 3.2.6: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, $H_{TS} = 0.5$ mm, Zeitliche Entwicklung der horizontal gemittelten Konzentration \bar{T} der stabilisierenden Substanz. a) \bar{T} vs z und t ; b) \bar{T} vs z (—) sowie theoretische Kurve (\cdots) zu den Zeitpunkten t_1 : $t = 100$ s und t_2 : $t = 400$ s. Die Kurven $\bar{T} \pm \sigma_T$ sind nicht dargestellt, ihre Abweichung zu \bar{T} liegt in der Größenordnung der Abweichung der theoretischen Kurve zu \bar{T} .

Diese Abweichung wird durch diejenigen Strukturen bewirkt, deren Spitzen die Ränder des Systems schon erreicht haben (erkennbar beispielsweise an Abb. 3.2.4, S. 43, bei $t = 200$ s, $H_{TS} = 0.32$ mm).

Aus dieser erkennbaren Umschichtung der anfänglich destabilisierend verteilten Substanz S stammt die Energie für die doppelt-diffusive Konvektion.

Die zeitliche Entwicklung der Konzentration der stabilisierenden Substanz \bar{T} ist in Abbildung 3.2.6.a) dargestellt, eine detailliertere Ansicht ist in Abb. 3.2.6.b) gegeben. Im Gegensatz zu der destabilisierenden Substanz sind in der Konzentration von \bar{T} nahezu keine Strukturen zu erkennen, dies wurde schon bei der Diskussion von Abb. 2.2.2 (Seite 19) deutlich. Aus diesem Grund wird in Abb. 3.2.6.b) auf eine Darstellung von σ_T verzichtet. Im Unterschied zu der destabilisierenden Substanz ist bei \bar{T} ein monoton abfallender Verlauf über den ganzen Zeitraum zu erkennen. Dieser Verlauf steht zumindest in keinem offensichtlichen Widerspruch zu dem einer rein diffusiven Ausbreitung.

Die Annahme einer rein diffusiven Ausbreitung der Konzentration \bar{T} ist die Basis der theoretischen Überlegungen in dieser Arbeit (siehe Seite 33). Diese Annahme soll nun quantitativ überprüft werden, indem die Ergebnisse der Simulation mit der theoretischen Formel für ein diffusives Konzentrationsprofil einer anfänglich stufenförmigen Verteilung (Gl. 3.1.4, Seite 34) verglichen werden. Hierzu muß die z Koordinate entsprechend der Position der anfänglichen Verteilung verschoben werden, d. h. $T(z, t) = \frac{T_0}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{z - \Delta z}{2\sqrt{D_T t}}\right)$. Die Verschiebung Δz sollte der anfänglichen Mischungshöhe H_{TS} entsprechen. In den Simulationen wurde der Druck p zu Beginn jedoch mit 0 initialisiert. Im statischen Fall gleicht der Druck das Gewicht der

Mischung aus, in den Simulationen baut sich dieser jedoch erst in den ersten Integrations-schritten auf. Daraus ergibt sich ein geringes Einsacken der Mischung, welches zu $\Delta z \lesssim H_{TS}$ führt. Dies ist an Abb. 3.2.6 für $t \approx 5$ s erkennbar. Demzufolge wurde für die theoretischen Kurven $\Delta z = 0.458$ verwendet. Anhand der zeitlichen Konstanz dieses Wertes ist zu erkennen, daß dies kein Randeffect ist, sondern auf die Initialisierung zurückgeführt werden kann. Das Ergebnis dieses Vergleichs ist in Abb. 3.2.6.b) dargestellt. Zwischen dem Konzentrationsprofil der Simulation und der theoretischen Annahme ist insgesamt nur ein geringer Unterschied festzustellen, die theoretische Kurve zeigt ein geringfügig schnelleres Verhalten. Dies bedeutet eine höhere Konzentration in der oberen und eine niedrigere Konzentration in der unteren Hälfte. Der Einfluß der endlichen Geometrie auf das Konzentrationsprofil ist für $t = 400$ s an den Rändern zu erkennen. Aufgrund der geschlossenen Randbedingungen ist in der Simulation in Randnähe ein kleinerer Gradient zu erkennen. Dies entspricht den theoretischen Erwartungen bei diesen Randbedingungen.

Aufgrund der guten Übereinstimmung zwischen Theorie und Simulation kann die ad hoc eingeführte Annahme einer diffusiven Ausbreitung der Konzentration T damit als gesichert angesehen werden.

Zeitliche Entwicklung der spektralen Amplitude

Da sich die theoretischen Annahmen in den Simulationen als anwendbar erwiesen haben, wird nun die theoretische Aussage über die zeitliche Entwicklung der spektralen Amplitude untersucht.

Die zeitliche Entwicklung dieser Amplitude einer typischen Simulation ist Abb. 3.2.7 dargestellt. In dieser Abbildung ist $A(t)$ gegenüber $t' = T' \cdot (t/T')^\xi$ aufgetragen. Durch die Skalierung t^ξ würde ein Verlauf von $A(t)$ entsprechend der theoretischen vorausgesagten Relation (Gl. 3.1.17, S. 36)

$$A(t) = A_0 \cdot \exp(c \cdot T_0^{\frac{1}{2}} t^{\frac{3}{4}}) \quad (3.2.2)$$

in der halblogarithmischen Darstellung mit $\xi = \frac{3}{4}$ als eine Gerade erscheinen. Durch die Normierung $T'^{1-\xi}$ können verschiedene Werte von ξ übersichtlich in einem Diagramm abgebildet werden. Für diese Darstellung wurde $T' = 100$ s gewählt; dies entspricht in etwa der Mitte des exponentiellen Anstiegs.

Anhand der Abbildung ist zu erkennen, daß $A(t)$ sich anfänglich ($t \lesssim 35$ s) erratisch verhält; dies spiegelt die Tatsache wieder, daß das anfängliche, unphysikalische Rauschen in $\vec{v}(\vec{r})$ abklingt. Für große Zeiten ($t \gtrsim 200$ s) zeigt sich eine Sättigung; dies ist, wie zuvor gezeigt, durch die endliche Ausdehnung des Systems gegeben. In dem Zwischenbereich kann man ein annähernd exponentielles Wachstum beobachten. Für $\xi = \frac{3}{4}$ kann der Verlauf von $A(t)$ in der halblogarithmischen Darstellung näherungsweise durch eine Gerade beschrieben werden; dies gilt jedoch auch für $\xi = \frac{1}{2}$ und 1.

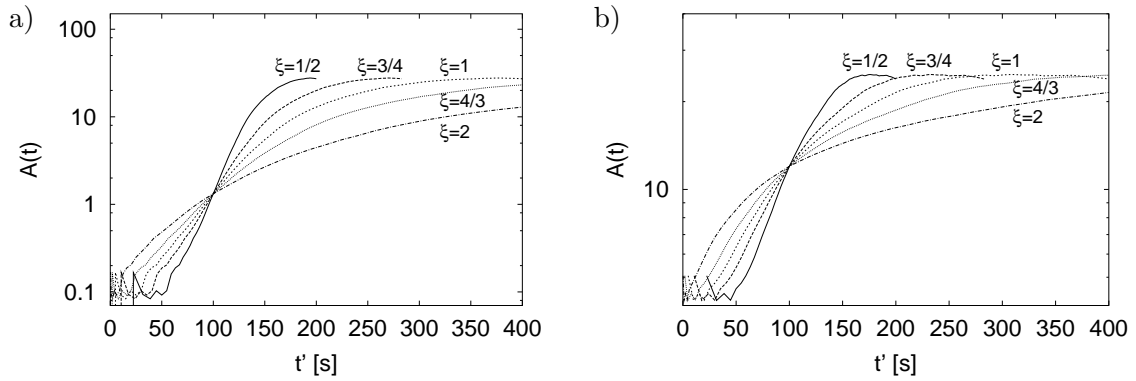


Abbildung 3.2.7: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, $H_{TS} = 0.5$ mm, $A(t)$ vs. $t' = T' \cdot (t/T')^\xi$ für $\xi = 1/2, 3/4, 1, 4/3$ und 2 sowie $T' = 100$ s; a) $|\bar{c}| < 10^{-6}$ m/s, b) $|\bar{c}| < 10^{-4}$ m/s.

Anhand der offensichtlichen Unterschiede in Abb. 3.2.1.a) (Seite 41) im zeitlichen Verhalten der spektralen Amplitude wäre zu vermuten, daß dies Unterschiede im anfänglichem Rauschen zu einer prinzipiellen Änderung im zeitlichen Verhalten der spektralen Amplitude führen. Durch einen Vergleich von Abb. 3.2.7.a) mit b) erkennt man jedoch, daß durch eine geeignete Skalierung diese Unterschiede verschwinden.

Es soll nun ξ quantitativ bestimmt werden, dazu wird das Verfahren aus [24, 26] benutzt. Hierzu wird durch die Transformationen

$$\tilde{A} = \ln A \quad \text{und} \quad \tilde{t} = t^\xi \quad (3.2.3)$$

und $\tilde{m} = cT_0^{1/2}a$, $\tilde{b} = \ln A_0$ obige Relation linearisiert zu

$$\tilde{A} = \tilde{b} + \tilde{m} \cdot \tilde{t} \quad (3.2.4)$$

mit. Diese Relation kann nun durch eine lineare Regression (siehe z. B. [9]) an die Simulationsdaten angepaßt werden; man erhält dadurch \tilde{b}_{Fit} und \tilde{m}_{Fit} . Man kann nun die Summe der Abweichungsquadrate (SSQ) definieren:

$$SSQ = \frac{1}{N(\tilde{T})} \sum_{\tilde{t} \in \tilde{T}} \left(\tilde{A}_i - (\tilde{m}_{Fit} \cdot \tilde{t} + \tilde{b}_{Fit}) \right)^2 \quad (3.2.5)$$

wobei \tilde{T} den Auswertungszeitraum und $N(\tilde{t})$ die Anzahl der darin enthaltenen Datenpunkte darstellt. Die Amplituden A_i sind zu den diskreten Zeitpunkten \tilde{t} gegeben. Die Summe der Abweichungsquadrate quantifiziert also offensichtlich die Güte der numerischen Ausgleichsrechnung. Durch die Variation von ξ erhält man verschiedene SSQ ; ein minimales SSQ spiegelt ein optimales ξ wieder. Der Auswertungszeitraum \tilde{T} erstreckt sich vom Beginn der Simulation bis zu dem Zeitpunkt, an dem die Finger durch den oberen oder unteren Rand beeinflußt werden.

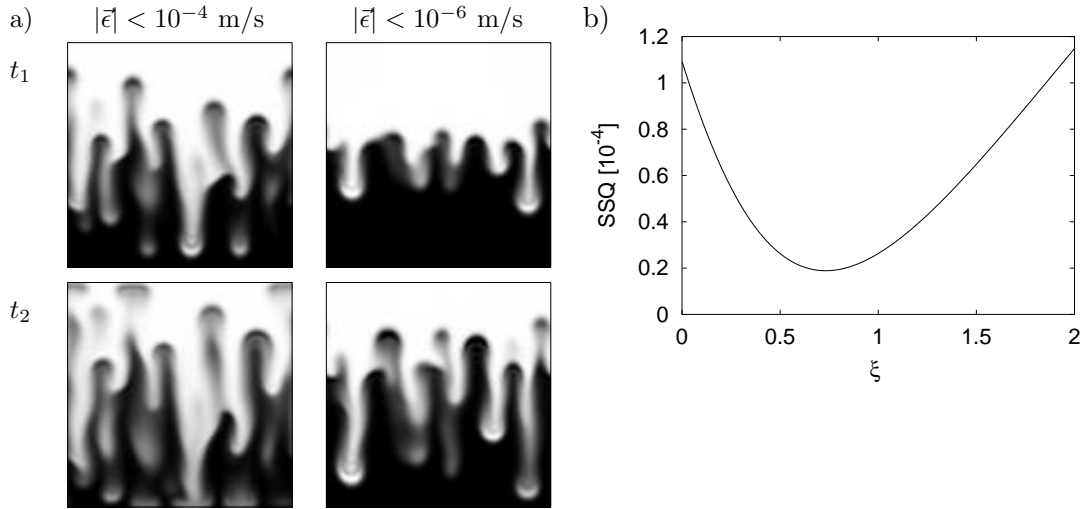


Abbildung 3.2.8: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, $H_{TS} = 0.5$ mm. a) senkrechte Schnitte zu unterschiedlichen Zeiten ($t_1 = 200$ s, $t_2 = 260$ s) und für unterschiedliches Rauschen. b) SSQ vs. ξ für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s und $0 < \bar{T} < 200$ s

Da der exakte Zeitpunkt der Beeinflussung des Systems durch den Rand schwierig exakt zu quantifizieren ist, wird diese Auswertung anhand zweier unterschiedlichen Rauschamplituden verifiziert. Wie man an Abb. 3.2.8.a) erkennen kann, ist dies für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s bei $t \approx 200$ s und für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-6}$ m/s bei $t \approx 260$ s der Fall. Desweiteren hat zu diesen Zeitpunkten die spektrale Amplitude bei beiden Parametern den selben Wert ($A \approx 21$, siehe Abb. 3.2.7 mit $\xi = 1$).

Wendet man nun das obige Verfahren zur Bestimmung von ξ auf die Simulationsdaten in den angegebenen Zeiträumen an, so erhält man für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ die in Abb. 3.2.8.b) dargestellte Verteilung der SSQ . Als optimales ξ wird dasjenige mit der kleinsten SSQ betrachtet. Der Fehler des optimalen ξ wird mittels eines F -Test bestimmt (siehe [5], Kap. 5.2.3.4). Die hierzu notwendige Normalverteilung erscheint aufgrund des in Abb. 3.2.8.b) erkennbaren Kurvenlaufs als plausibel. Für ein Signifikanzniveau von $\alpha = 0.1$ sowie $n = m = 40$ (für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s) bzw. $n = m = 52$ (für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-6}$ m/s) können die entsprechenden Quotienten der Varianzen aus [5], Tafel 1.1.2.13, abgelesen werden. Die Differenz des optimalen ξ zu den ξ mit den SSQ , die diese Schranken gerade noch erfüllen, ergibt den Fehler des optimalen ξ . Somit erhält man $\xi = 0.704^{+0.314}_{-0.228}$ für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-6}$ m/s und $\xi = 0.732^{+0.337}_{-0.283}$ für $|\bar{\epsilon}| < 1 \cdot 10^{-4}$ m/s. Die durch diese Verfahren bestimmten Werte ξ stimmen im Rahmen der Bestimmungsgenauigkeit gut mit dem theoretisch vorhergesagten Wert von $\xi = \frac{3}{4}$ überein, der großen Fehler vermindert jedoch die Aussagekraft dieser Werte. Insbesondere können andere Werte von ξ nicht definitiv ausgeschlossen werden, wie man schon anhand von Abb. 3.2.7 intuitiv vermuten könnte. Demzufolge wird auch mit diesen Ergebnissen nicht weitergearbeitet.

Zeitliche Entwicklung der Wellenlänge

Für die folgenden Simulationen wird eine anfängliche Mischungshöhe von $H_{TS} = 0.16$ mm verwendet, da bei dieser Höhe die pro Grundflächeneinheit vorhandene Menge an T und S mit der experimentellen Situation übereinstimmt. Da in vorhergehenden Simulation gezeigt wurde, daß die anfängliche Höhe keinen Einfluß auf die Wellenlänge hat, bewirkt diese Wahl keine Einschränkung der Gültigkeit und Vergleichbarkeit der daraus folgenden Ergebnisse.

Die zeitliche Entwicklung eines typischen Systems mit diesen Parametern ist in Abb. 3.2.9 dargestellt. Anhand der Bilder erkennt man, daß die Strukturen zum einen erwartungsgemäß im Laufe der Zeit deutlicher werden und zum anderen die Wellenlänge zunimmt. Dies wird insbesondere bei einer der Betrachtung der seitlichen Schnitte und der Fouriertransformierten in Abb. 3.2.9.b) und c) deutlich.

Die Zunahme der Wellenlänge ist in Abb 3.2.10 quantitativ dargestellt. Weiterhin wurde in diesem Diagramm die theoretisch zu erwartenden Wellenlänge dargestellt. Aufgrund der Unhandlichkeit der exakten Formel von Schmitt (siehe Gl. 2.1.19, S. 13) wird die Formel von Stern verwendet: $\lambda \approx \sqrt{2\pi}[\nu D_T / (g\alpha_T T_z)]^{1/4}$ (Gl. 2.1.17 auf S. 13). Zur Berechnung wird sowohl der maximale Gradient (Gl. 3.1.8 auf S. 34) als auch der mittlere Gradient (Gl. 3.1.15 auf

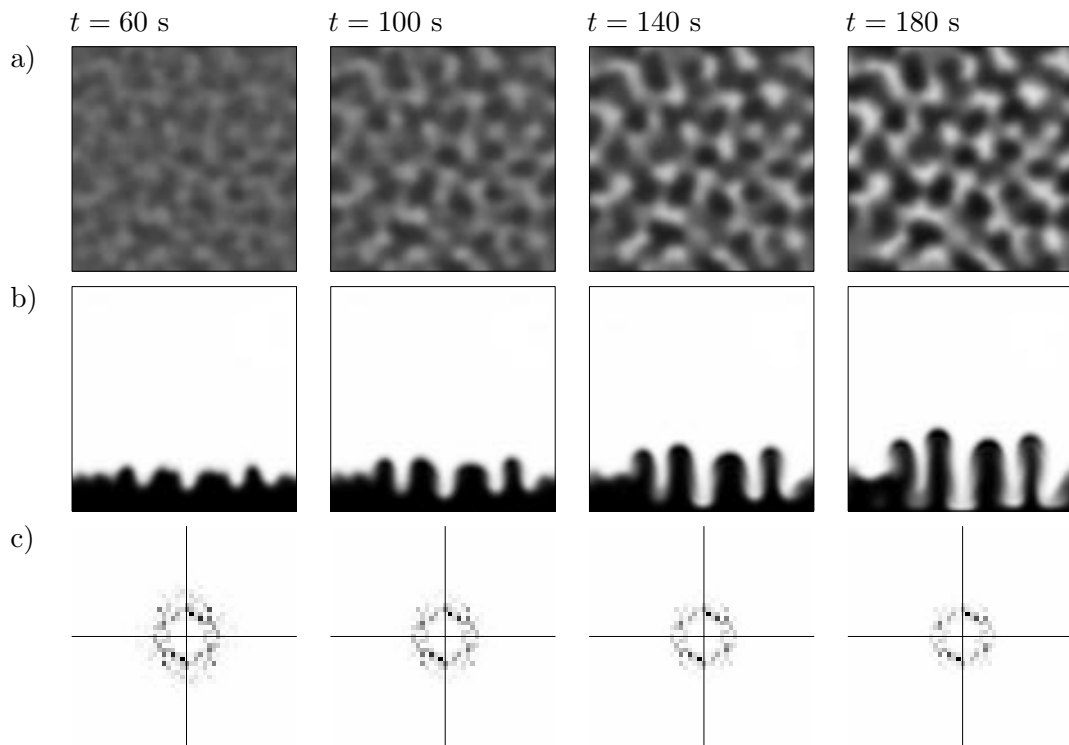


Abbildung 3.2.9: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.025$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, Zeitliche Entwicklung. a) Aufsicht, b) seitliche Schnitte; c) Fouriertransformierte der in a) dargestellten Bilder.

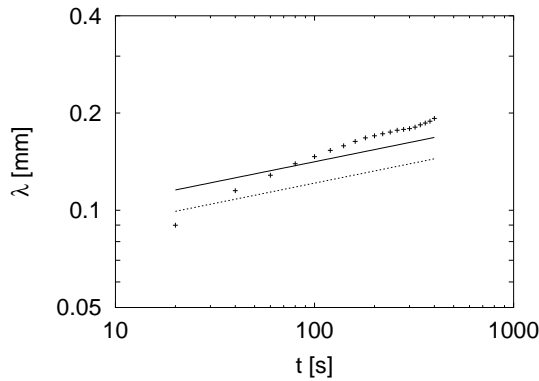


Abbildung 3.2.10: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.025$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, Zeitliche Entwicklung der Wellenlänge der Simulation aus Abb. 3.2.9, sowie $\lambda \approx \sqrt{2\pi}[\nu D_T/(g\alpha_T T_z)]^{1/4}$. Für den Konzentrationsgradienten T_z wird der maximale Gradient $T_{z,Max}$ (\cdots) (siehe Gl. 3.1.8 auf S. 34) und der mittleren Gradienten \bar{T}_z ($—$) (siehe Gl. 3.1.15 auf S. 36) verwendet.

S. 36) benutzt. Aufgrund der theoretischen Überlegungen (Gl. 3.1.20 auf Seite 37) ist zu erwarten, daß sich die Wellenlänge gemäß $\lambda \propto t^{1/8}$ verhält. Anhand der doppel-logarithmischen Darstellung kann man erkennen, daß weder diese Relation noch ein anderes Skalengesetz über den ganzen Beobachtungszeitraum exakt eingehalten wird. Insbesondere ist eine Abweichung von dem theoretisch vorhergesagten $t^{1/8}$ Verhalten für kleine Zeiten zu beobachten. Dies könnte dadurch verursacht werden, daß die Simulationen mit einem Rauschen in den Strömungsvektoren initialisiert werden. Dies würde eine schnellere Verbreiterung der Grenzschicht und damit ein schnelleres Ansteigen der Wellenlänge verursachen. Im Laufe der Zeit klingt diese Strömung durch innere Reibung ab und der Konzentrationsgradient ist rein diffusionsgetrieben. Dies ist an der besseren Übereinstimmung für größere Zeiten zu erkennen. Anhand der Abbildung erkennt man, daß der mittlere Gradient eine bessere Übereinstimmung liefert.

3.2.1.4 Konzentrationsabhängigkeit

Nachdem den in den vorangegangenen Abschnitten alle Grundlagen anhand der Simulationsdaten überprüft worden sind, sollen nun in diesem Kapitel die eigentlichen Kernaussagen des theoretischen Teils verifiziert werden. Diese sind die Änderungen der Wellenlängen und Wachstumszeiten bei Änderungen in den anfänglichen Konzentrationen. Die Konzentrationen werden derart variiert, daß das Stabilitätsverhältnis konstant bleibt.

In Abb. 3.2.11.a) sind Simulationen mit unterschiedlichen Anfangskonzentrationen dargestellt. Deutlich sichtbar ist eine Abnahme der Wellenlänge bei einer Zunahme der Konzentration. Dies ist in Abb. 3.2.12.b) quantitativ dargestellt. Desweiteren ist ein zeitliches Anwachsen der Wellenlänge zu erkennen; dies wurde schon anhand von Abb. 3.2.10 diskutiert. Eine Variation der Konzentration führt somit zu einer Verschiebung der in 3.2.12.b) dargestellten Geraden. Das in der Abb. 3.2.9 erkennbare Anwachsen der Deutlichkeit wird quantifiziert durch die spektrale Amplitude (siehe Abb. 3.2.12.a)). Man erkennt, daß $A(t)$ erwartungsgemäß für verschiedene Konzentrationen denselben Verlauf hat und dieser nur auf einer anderen Zeitskala

stattfindet. Nach dem Maximums fällt die spektrale Amplitude etwas ab. Dies wird das Erreichen des Bodens durch die Zwischenräume zwischen den Fingern und die dadurch bedingte Abnahme der Deutlichkeit der Strukturen verursacht; dies wurde anhand von Abb. 3.2.3 und Abb. 3.2.4 (Seite 42) diskutiert.

In Abb. 3.2.11.b) sind senkrechte Schnitte für verschiedene Konzentrationen dargestellt, zu diesen Zeitpunkte haben beide System die gleiche spektrale Amplitude ($A(t) \approx 10$). An diesen Bilder erkennt man, daß die Strukturen beider Systeme bei dieser Amplitude den Boden nahezu erreicht haben, sich also in dem selben Stadium der zeitlichen Entwicklung befinden. Damit wird deutlich, daß die spektrale Amplitude eine geeignete Größe ist, um die zeitliche Entwicklung des Systems zu charakterisieren. Die größere Höhe der Finger bei niedrigeren Konzentrationen liegt darin begründet, daß die Finger die gleiche Form, d. h. das gleiche Verhältnis aus Höhe und Breite haben. Die Form der Finger wird an einer späteren Stelle betrachtet.

Als der zentrale Punkt diese Kapitels soll nun das theoretisch vorhergesagte Skalenverhalten der Wellenlänge $\lambda(T_0)$ und der Wachstumszeit $T_{em}(T_0)$ anhand der Simulationsdaten überprüft werden. Hierzu wird die Zeit bestimmt, bei der das System eine gegebene spektrale Amplitude A_{crit} erreicht hat. Da die Werte von A und λ der Simulationen nur zu diskreten Zeitpunkten vorliegen, wird ein zeitlich kontinuierlicher Verlauf $A(t)$ durch eine Interpolation zweier jeweils aufeinanderfolgender A approximiert. Die Wachstumszeit T_{em} ist der Zeitpunkt bei dem diese Interpolation die kritische Amplitude erreicht. Durch diese Vorgehensweise sind die Werte von T_{em} nicht auf die diskreten Zeitpunkte der Simulationen beschränkt. Die Wellenlänge λ wird zum Zeitpunkt T_{em} bestimmt. Da dieser Zeitpunkt in der Regel zwischen zwei Meßzeitpunkten liegt, wird ein zeitlich kontinuierlicher Verlauf $\lambda(t)$ ebenso durch die Interpolation zweier jeweils aufeinanderfolgender λ approximiert. Bei beiden Interpolationen hat es sich als unerheblich herausgestellt, ob die Interpolation linear oder exponentiell erfolgt. Als ein typisches Beispiel sind die Ergebnisse bei $A_{crit} = 10$ für die Wachstumszeit in Abb. 3.2.13.a) und für die Wellenlänge in Abb. 3.2.13.b) dargestellt. Aufgrund des linearen Verlaufs in der doppellogarithmischen Darstellung erkennt man, daß sich beide Meßgrößen deutlich gemäß einem Skalengesetz verhalten. Eine numerische Bestimmung der Ausgleichsgeraden

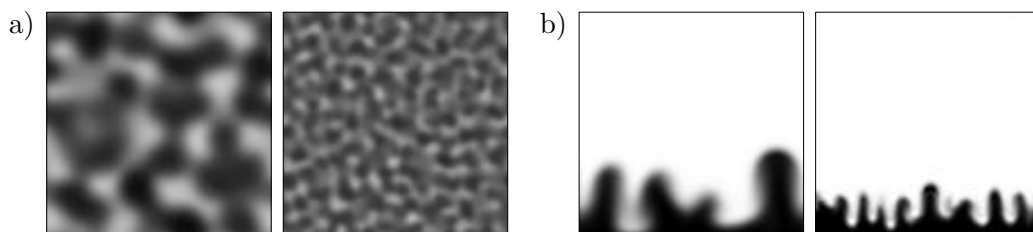


Abbildung 3.2.11: Stufenförmige Anfangsbedingung, $R'_p = 1$. Jeweils links ist $T_0 = 0.1$ VolTeile bei $t = 45$ s dargestellt, entsprechend rechts $T_0 = 0.00625$ VolTeile bei $t = 320$ s. a) Aufsichten; a) Seitliche Schnitte.

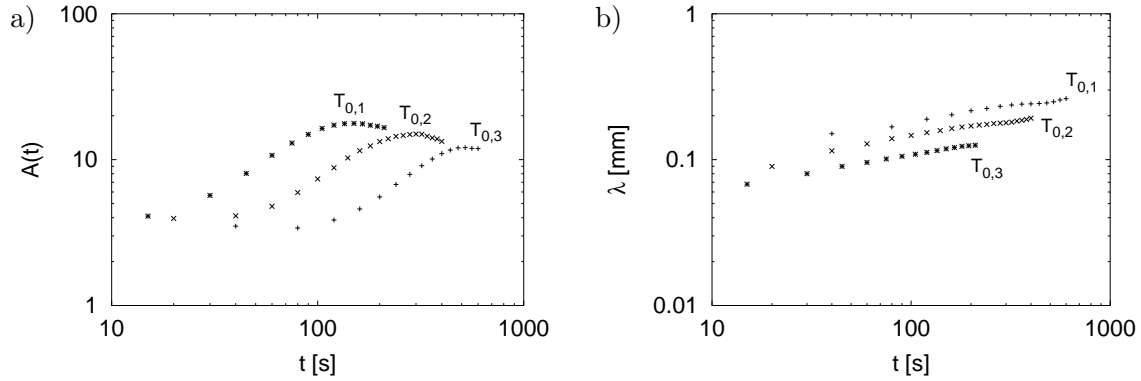


Abbildung 3.2.12: Stufenförmige Anfangsbedingung mit unterschiedlichen Konzentrationen T_0 , $T_{0,1} = 0.00625$, $T_{0,2} = 0.025$ und $T_{0,3} = 0.1$ VolTeile, $R'_\rho = 1$. a) $A(t)$ vs t ; b) λ vs. t .

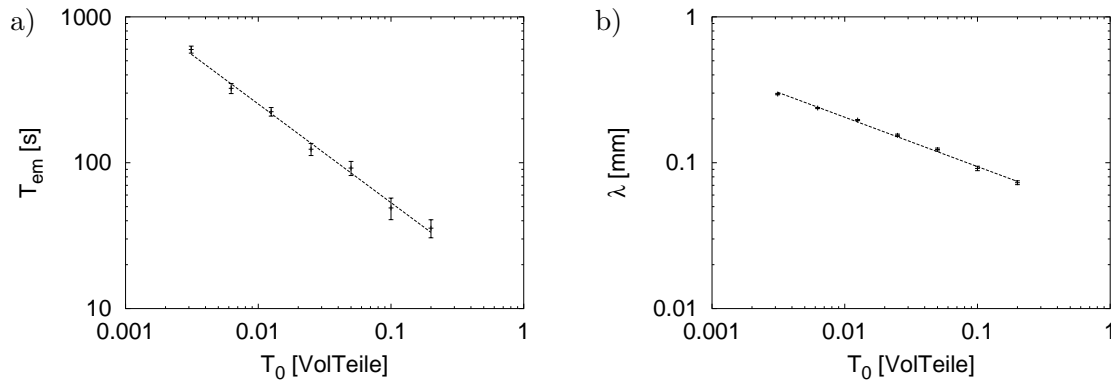


Abbildung 3.2.13: Stufenförmige Anfangsbedingung, $A_{crit} = 10$. $R'_\rho = 1$. a) T_{em} vs T_0 ; b) λ vs T_0 sowie Ausgleichsgeraden (die Parameter können dem Text entnommen werden).

($T_{em} \propto T_0^{\gamma_T}$ bzw. $\lambda \propto T_0^{\gamma_\lambda}$) liefert die Exponenten für die Wachstumszeit $\gamma_T = -0.676 \pm 0.024$ und für die Wellenlänge $\gamma_\lambda = -0.325 \pm 0.008$. Beide Werte stimmen überzeugend mit der theoretischen Vorhersage von $\gamma_T = -\frac{2}{3}$ für T_{em} und $\gamma_\lambda = -\frac{1}{3}$ für λ überein.

Da in den theoretischen Überlegungen keinerlei Einschränkung bezüglich der Auswertungsamplitude A_{crit} gemacht wird, wird dies nun anhand der Bestimmung der Exponenten für verschiedene Amplituden verifiziert. Die Unter- und Obergrenze für A_{crit} ergibt sich aus dem zeitlichen Verlauf der spektralen Amplitude für unterschiedliche T_0 ; dies ist ersichtlich aus Abb. 3.2.12.a). Die Ergebnisse sind in Abb. 3.2.14.a) dargestellt, man erkennt insbesondere für größere Amplituden eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Werten. Eine systematische Veränderung des Skalenverhaltens für unterschiedliche spektrale Amplituden ist nicht zu beobachten. Dies spricht in Übereinstimmung mit den theoretischen Annahmen für den allgemeinen Charakter dieses Skalenverhaltens. Der gewichtete Mittelwert der Exponenten für alle ausgewerteten spektralen Amplituden ergibt $\gamma_T = -0.668 \pm 0.052$ und $\gamma_\lambda = -0.314 \pm 0.033$. Beide Werte stimmen mit den theoretischen Vorhersagen überein.

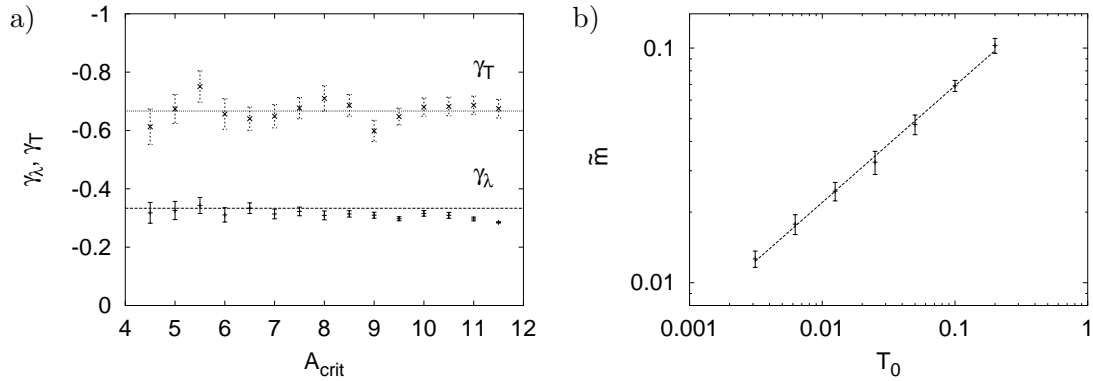


Abbildung 3.2.14: Stufenförmige Anfangsbedingung, a) γ_λ und γ_T vs. A_{crit} sowie die theoretische vorhergesagten Werte von $\gamma_\lambda = -\frac{1}{3}$ und $\gamma_T = -\frac{2}{3}$; b) \tilde{m} vs T_0 , und numerisch bestimmte Ausgleichsgerade, die Parameter sind im Text angegeben.

Eine Variation von A_{crit} führt somit nur zu einer Parallelverschiebung der in Abb. 3.2.13.a) und b) dargestellten Geraden. Im Detail bedeutet dies: Eine Erhöhung von A_{crit} bewirkt eine Erhöhung von T_{em} und λ (und umgekehrt). Die Richtung der Parallelverschiebung ist bei Betrachtung von Abb. 3.2.12.a) und b) unmittelbar einsichtig.

Um die Überprüfung der theoretischen Relationen zu vervollständigen, soll jetzt die Konzentrationsabhängigkeit des Exponenten aus Gl. 3.1.17 (Seite 36) überprüft werden. Also wird der Logarithmus der Gleichung

$$A(t) = A_0 \cdot \exp(c \cdot T_0^{\frac{1}{2}} t^{\frac{3}{4}}) \quad (3.2.6)$$

durch die Transformationen

$$\tilde{A} = \ln A \quad \text{und} \quad \tilde{t} = t^{\frac{3}{4}} \quad (3.2.7)$$

und $\tilde{m} = c \cdot T_0^{1/2}$, $\tilde{b} = \ln A_0$ linearisiert zu

$$\tilde{A} = \tilde{b} + \tilde{m} \cdot \tilde{t} \quad (3.2.8)$$

Da c eine Konstante ist, sollte $\tilde{m} \propto T_0^{1/2}$ gelten. Diese Relation wird nun einzeln an jede Zeitreihe (siehe beispielsweise Abb.3.2.12.a) auf Seite 52) für verschiedene T_0 angepaßt, wobei der Auswertungszeitraum jeweils derart gewählt wird, das $A < 10$ gilt, da die Strukturen hier den Rand erreichen (siehe Seite 52).

Die aus dieser Auswertung resultierenden \tilde{m} sind in Abb. 3.2.14.b) dargestellt. Man erkennt sehr deutlich einen einem Skalengesetz entsprechenden Verlauf. Eine numerisch bestimmte Ausgleichsgerade dieser Daten ergibt einen Exponenten von $\gamma_a = 0.497 \pm 0.011$, welcher gut mit dem theoretischen Wert von $\frac{1}{2}$ übereinstimmt.

3.2.1.5 Variation des Stabilitätsverhältniss

In diesem Abschnitt soll überprüft werden, inwieweit das bisher beobachtete Skalenverhalten bei der Wellenlänge und Wachstumszeit in Abhängigkeit von den Anfangskonzentrationen auch für andere Stabilitätsverhältnisse $R'_\rho \left(\equiv \frac{T_0}{S_0} \right)$ auftritt. Dafür werden weitere Simulationsreihen mit $R'_\rho = 0.5$ und 2 sowie ansonsten gleichen Parametern wie zuvor durchgeführt. Die Auswertung der Simulationsdaten erfolgt dabei wie im vorhergehenden Kapitel.

Die zeitliche Entwicklung der spektralen Amplitude für verschiedene Konzentrationen und verschiedene Stabilitätsverhältnisse ist in Abb. 3.2.15 dargestellt. Prinzipielle Unterschiede im Verlauf der Kurven sind nicht erkennbar. Durch einen Vergleich von Abb. 3.2.12.a) (Seite 52) mit Abb. 3.2.15.a) und b) erkennt man, daß ein größeres Stabilitätsverhältnis zu einem langsameren Wachstum, und damit zu einem deutlicheren Anstieg in der spektralen Amplitude führt. Dies wird durch die Form der Strukturen verursacht, wie in Abb. 3.2.16 dargestellt. Die Zeitpunkte der Darstellung wurden so gewählt, daß alle Systeme gerade den Boden erreichen.

Man erkennt deutlich, daß ein anwachsendes Stabilitätsverhältnis zu 'geraderen' und regelmäßigeren Fingern führt, dies wurde beispielsweise schon in [54] anhand von Experimenten gezeigt. Eine lokal höhere Konzentration an destabilisierender Substanz S hat bei einem größerem Stabilitätsverhältnis einen geringeren destabilisierenden Einfluß aufgrund der höheren Konzentration an stabilisierender Substanz T . Dies führt zu einem langsameren Wachstum der Finger, wodurch die Finger aufgrund der Diffusion von S eine größere Breite erhalten. Das langsamere Wachstum führt aufgrund des ausgleichenden Effektes der Diffusion zu den regelmäßigeren Fingern.

Die bei einem niedrigerem Stabilitätsverhältnis insgesamt höheren spektralen Amplituden (Abb. 3.2.15) sind durch die Form der Finger bedingt. Die Summe der Beträge der zur Darstellung einer 'eckigen' Funktion im Frequenzraum benötigten Amplituden ist insgesamt größer

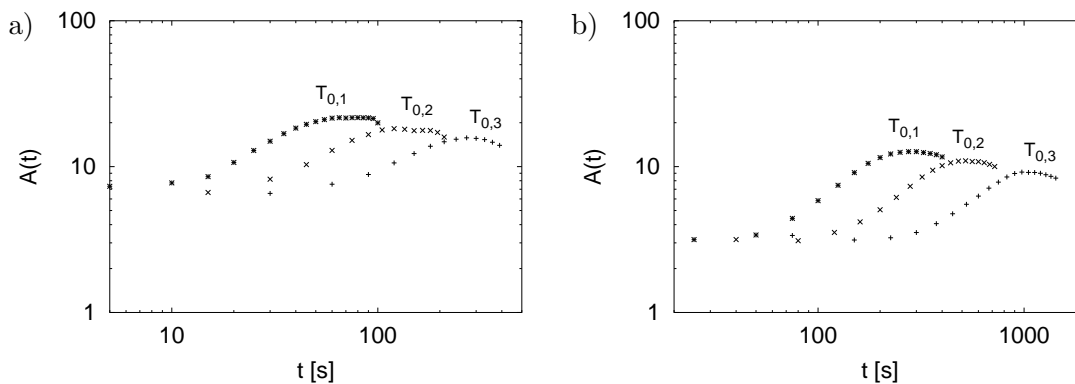


Abbildung 3.2.15: Stufenförmige Anfangsbedingung mit unterschiedlichen Konzentrationen T_0 , $T_{0,1} = 0.00625$, $T_{0,2} = 0.025$ und $T_{0,3} = 0.1$ VolTeile, $A(t)$ vs t . a) $R'_\rho = \frac{1}{2}$; b) $R'_\rho = 2$.

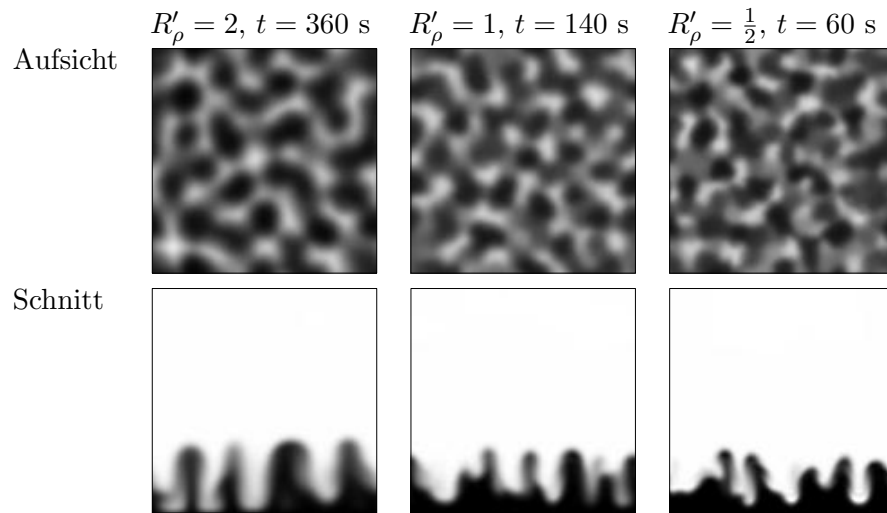


Abbildung 3.2.16: Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_0 = 0.25$ VolTeile, Aufsichten und seitliche Schnitte für unterschiedliche Stabilitätsverhältnisse.

als bei einer sinusförmigen. Dies ist beispielsweise durch den Vergleich der Fourierentwicklungen einer Sinusfunktion und einer Rechteckfunktion unmittelbar einsichtig (siehe z.B. [5], Kap. 4.4.1.2). Somit ergeben sich für ein niedrigeres Stabilitätsverhältnis aufgrund der ‘eckigeren’ Finger (Abb. 3.2.16) höhere spektrale Amplituden. In der Aufsicht hingegen ist die unterschiedliche Form der Finger nur andeutungsweise zu erkennen.

Bei diesen Simulationen wurde ebenso das Verhalten der Wachstumszeit und der Wellenlänge bestimmt. Die zeitliche Entwicklung der Wellenlänge entspricht der für $R'_\rho = 1$ (siehe Abb.3.2.12.b) auf S. 52), deswegen wurde auf eine Darstellung verzichtet. Die Abhängigkeit der Wellenlänge und Wachstumszeit von der Konzentration ist in Abb 3.2.17.a) und b) dargestellt. Die kritische Amplitude wurde derart gewählt, daß die System gerade den Boden erreichen (siehe hierzu

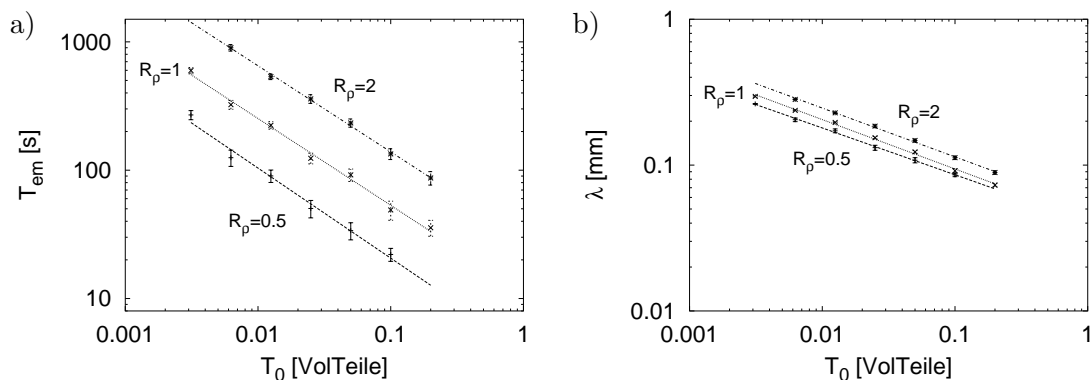


Abbildung 3.2.17: Stufenförmige Anfangsbedingung, $R'_\rho = 0.5$ ($A_{crit} = 12$), $R'_\rho = 1$ ($A_{crit} = 10$) und $R'_\rho = 2$ ($A_{crit} = 8.5$); a) T_{em} vs T_0 ; b) λ vs T_0 .

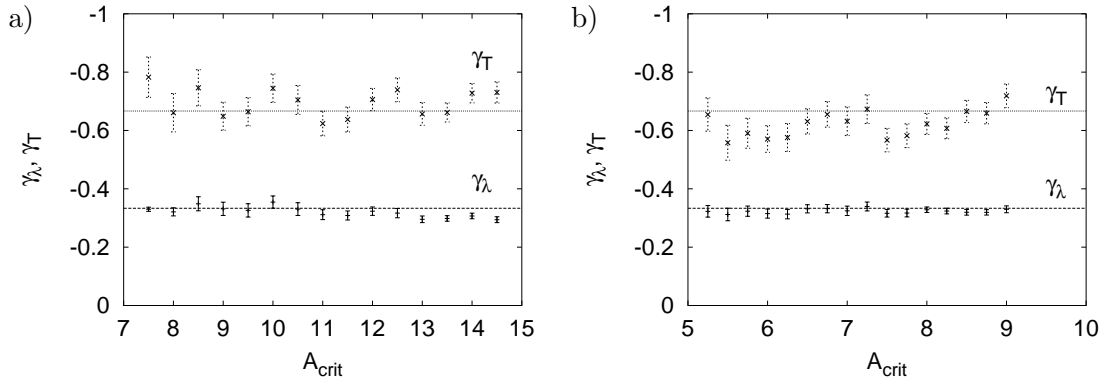


Abbildung 3.2.18: Stufenförmige Anfangsbedingung, γ_λ und γ_T vs. A_{crit} sowie die theoretische vorhersagten Werte von $\gamma_\lambda = -\frac{1}{3}$ und $\gamma_T = -\frac{2}{3}$; a) $R'_\rho = 0.5$, b) $R'_\rho = 2$.

auch Abb. 3.2.16). Anhand beider Diagrammen erkennt man, daß eine Variation des Stabilitätsverhältnis nur zu einer Parallelverschiebung der Geraden (in der doppelt-logarithmischen Darstellung) führt. Im Detail bedeutet dies, daß eine Erhöhung von R'_ρ zu einer Erhöhung von T_{em} und λ führt (und vice versa). Eine prinzipielle Änderung des Systemverhaltens ist hingegen nicht zu beobachten. Eine numerische Regression liefert für $R'_\rho = 2$ die Skaleneponenten von $\gamma_T = -0.636 \pm 0.018$ und $\gamma_\lambda = -0.314 \pm 0.010$ sowie für $R'_\rho = \frac{1}{2}$ von $\gamma_T = -0.670 \pm 0.014$ und $\gamma_\lambda = -0.334 \pm 0.010$.

Auch bei diesen Meßreihen wurde die Abhängigkeit der Skaleneponenten von der kritischen Amplitude bestimmt; das Vorgehen erfolgt analog zum vorherigen Kapitel. Die Ergebnisse dieser Auswertung sind in Abb. 3.2.18 dargestellt. Auch hier erkennt man, daß diese Amplitude keinen systematischen Einfluß auf die Skaleneponenten hat. Für ein Stabilitätsverhältnis von $R'_\rho = 0.5$ ergeben sich gemittelte Skaleneponenten von $\gamma_\lambda = -0.320 \pm 0.032$ und $\gamma_T = -0.695 \pm 0.055$ und für $R'_\rho = 2$ von $\gamma_\lambda = -0.323 \pm 0.030$ und $\gamma_T = -0.623 \pm 0.052$. Diese Werte stimmen mit den Werten für $R'_\rho = 1$ sowohl untereinander als auch mit den theoretischen Vorhersagen von $\gamma_\lambda = -\frac{1}{3}$ und $\gamma_T = -\frac{2}{3}$ überein.

Abschließend läßt sich also feststellen, daß die theoretischen Vorhersagen für ein anfänglich stufenförmiges Konzentrationsprofil überzeugend mit den Ergebnissen der Simulationen übereinstimmen.

3.2.2 Lineare Anfangsbedingung

Experimentell ist ein stufenförmige Anfangsbedingung nicht oder nur schwierig zu realisieren, da durch Einfüllvorgänge oder das Entfernen von Trennwänden immer Verwirbelungen auftreten, die die Grenzschicht zwischen den Bereichen unterschiedlicher Konzentration verbreitern. Aus diesem Grund wird jetzt ein Konzentrationsprofil betrachtet, daß einen anfänglich räum-

lich ausgedehnten Gradienten $\neq 0$ besitzt. Hierzu bietet sich ein lineares Profil an, da es zum Einen eine einfache Umsetzung ist und zum Anderen einfache Vergleiche mit den Theorien vom Stern [49] und Schmitt [37] erlaubt.

Die Anfangsverteilung in $T(z)$ nimmt dabei von T_0 am Boden (also bei $z = 0$) linear ab bis $T(z) = 0$ für $z \geq 2H_{TS}$ erreicht wird; gleiches gilt für S . Die Höhe dieser Anfangsbedingung wurde also doppelt groß wie die Höhe der stufenförmigen Anfangsbedingung gewählt, somit befindet sich für beide Anfangsbedingungen dieselbe Menge an Substanzen pro Grundflächeneinheit im System. Alle übrigen Parameter entsprechen denen der vorhergehenden Simulationen.

3.2.2.1 Zeitliche Entwicklung

Die zeitliche Entwicklung einer typischen Simulation mit einem anfänglich linearem Konzentrationsprofil ist in Abb. 3.2.19 dargestellt. Im Vergleich zu einer Simulation mit einem anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofil (siehe Abb. 3.2.9 auf S. 49) ist die gleiche wabenförmige Struktur erkennbar. Im Unterschied zu den vorherigen Simulationen findet die Strukturbildung jedoch langsamer statt und es entsteht eine größere Wellenlänge. Diese Unterschiede ergeben sich aus dem geringeren Konzentrationsgradienten bei einem anfänglich linearem Konzentrationsprofil.

Das Anwachsen der Deutlichkeit der Strukturen wird quantifiziert durch die spektrale Amplitude; dies ist in Abb. 3.2.20.a) dargestellt. Im Vergleich zu einem anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofil (siehe Abb. 3.2.12.a) auf S. 52) ist das eben erwähnte langsamere Wachstum erkennbar. Der grundsätzliche Verlauf dieser Kurven, wie auch deren Verhalten bei einer

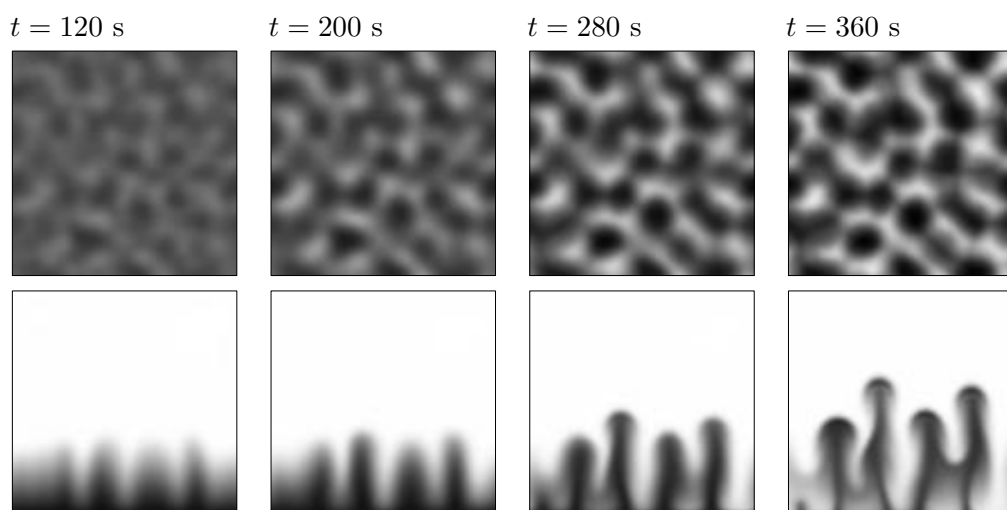


Abbildung 3.2.19: Anfänglich lineares Konzentrationsprofil, $R'_p = 1$, $T_0 = 0.025$ VolTeile, Zeitliche Entwicklung in der Aufsicht sowie seitliche Schnitte.

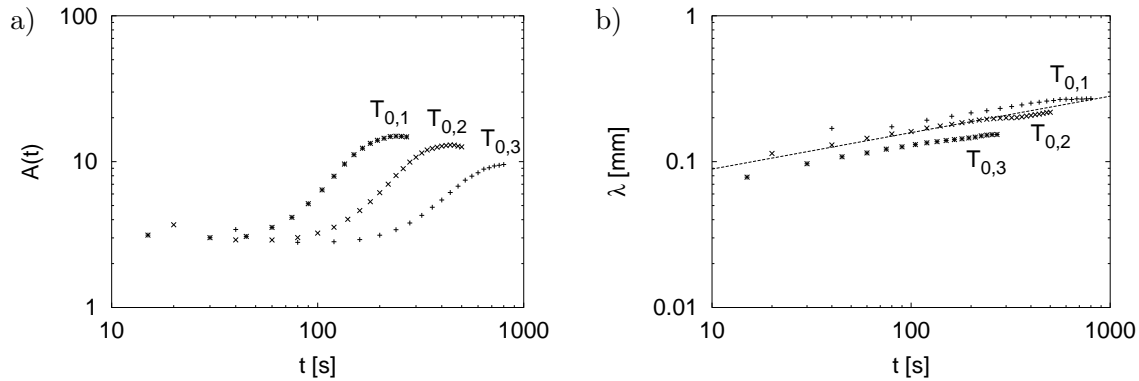


Abbildung 3.2.20: Anfänglich lineares Konzentrationsprofil mit unterschiedlichen Konzentrationen T_0 , $T_{0,1} = 0.00625$, $T_{0,2} = 0.025$ und $T_{0,3} = 0.1$ VolTeile, $R'_\rho = 1$. a) $A(t)$ vs t ; b) λ vs. t sowie $\lambda \propto t^{1/4}$.

Veränderung bei einer Variation von T_0 , sind hingegen vergleichbar.

Die zeitliche Entwicklung der Wellenlänge für verschiedene Konzentrationen ist in Abbildung 3.2.20.b) dargestellt. Man erkennt ein Ansteigen der Wellenlänge im Laufe der Zeit; dieser Anstieg entspricht jedoch nicht exakt einem Skalengesetz. Dieses Verhalten wurde auch schon bei einem anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofil beobachtet (Abb. 3.2.10 auf S. 50 und Abb. 3.2.12.b) auf S. 52). Der zeitliche Anstieg kann näherungsweise empirisch durch $\lambda \propto t^{1/4}$ beschrieben werden; dies ist ein Unterschied zu dem zuvor beobachtetem Verhalten. Der schnellere zeitliche Anstieg der Wellenlänge deutet auf einen rascheren Abfall des Konzentrationsgradienten T_z . Desweiteren ist bei einem anfänglich linearem Konzentrationsprofil die Bedingung für doppelt-diffusive Konvektion von Beginn an überall in der Mischung erfüllt. Dies führt dazu, daß die Finger in allen Schichten gleichzeitig wachsen. Anschaulich kann man dies an Abb. 3.2.19 für $t = 120$ s erkennen. Dies ist ein weiterer Unterschied zu einem stufenförmigen Konzentrationsprofil, bei dem die Finger von der Grenzschicht ausgehend nach oben und unten wachsen (siehe Abb. 3.2.4 auf S. 43 und Abb. 3.2.9 auf S. 49).

3.2.2.2 Konzentrationsabhängigkeit

Als der Hauptpunkt dieses Abschnitts soll nun das Verhalten der Wellenlänge und der Wachstumszeit in Abhängigkeit von der Konzentration bestimmt werden. Auf eine quantitative Analyse der spektralen Amplitude, wie bei dem stufenförmigen Konzentrationsprofil, wird aufgrund der fehlenden theoretischen Beschreibung verzichtet. Die Konzentrationsabhängigkeit der Wellenlänge und Wachstumsrate ist insbesondere für einen späteren Vergleich mit Experimenten relevant; deren Bestimmung wird dabei wie im vorherigen Kapitel durchgeführt. Das Verhalten der Wellenlänge und der Wachstumszeit bei einer Variation der Konzentration ist in Abb. 3.2.21 dargestellt. Die Bestimmung dieser Werte wird bei derjenigen spektrale

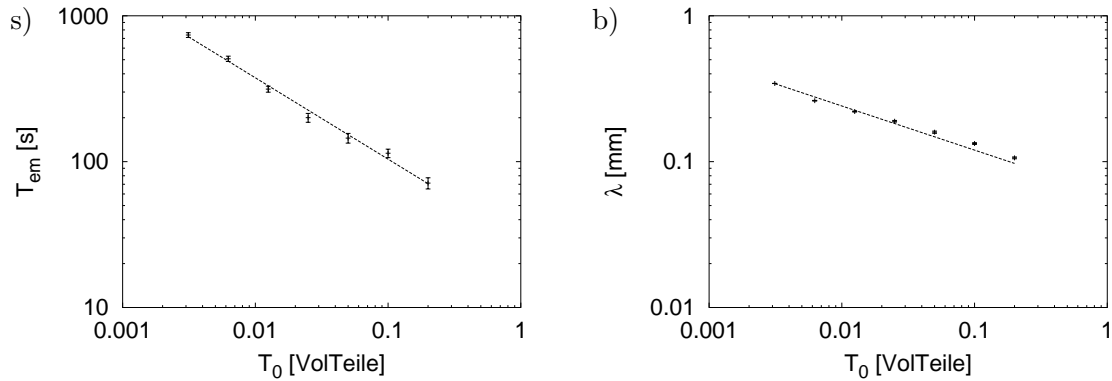


Abbildung 3.2.21: Anfänglich lineares Konzentrationsprofil, $R'_\rho = 1$, $A_{crit} = 7$. a) T_{em} vs T_0 , b) λ vs T_0 . Die Werte der numerisch bestimmten Ausgleichsgeraden können dem Text entnommen werden.

Amplitude durchgeführt, bei der die Strukturen den Boden erreichen. Diese liegt bei $A_{crit} \approx 7$ und ist durch einen Vergleich von Abb. 3.2.19 mit Abb. 3.2.20.a) zu erkennen.

An der Abbildung erkennt man, daß sich sowohl T_{em} (Abb. 3.2.21.a)) als auch λ (Abb. 3.2.21.b)) gemäß einem Skalengesetz verhalten. Eine numerische bestimmte Ausgleichsgerade für $T_{em}(T_0) \propto T_0^{\gamma_T}$ bzw. $\lambda(T_0) \propto T_0^{\gamma_\lambda}$ lieferte Exponenten von $\gamma_T = -0.558 \pm 0.021$ bzw. $\gamma_\lambda = -0.303 \pm 0.004$. Diese Werte liegen zwar in der Nähe der Werte für eine stufenförmige Anfangsbedingung von $\gamma_T = -\frac{2}{3}$ bzw. $\gamma_\lambda = -\frac{1}{3}$, sind aber beide aufgrund ihrer Fehlergrenzen nicht mit ihnen verträglich.

Um zu überprüfen, inwieweit diese Exponenten von der speziellen Wahl der kritischen Amplitude abhängen, wird nun die Bestimmung der Exponenten in Abhängigkeit von A_{crit} durchgeführt. Anhand der Ergebnisse in Abb. 3.2.22 erkennt man, daß die Exponenten nicht systematisch von der speziellen Wahl der kritischen Amplitude abhängen. Die gewichteten Mittelwerte der Exponenten von $\gamma_T = -0.542 \pm 0.049$ und $\gamma_\lambda = -0.287 \pm 0.026$ sind jedoch mit den theoretischen Vorhersagen für eine stufenförmige Anfangsbedingung nicht verträglich. Darüberhinaus sind in der Abb. 3.2.22 die Skalenexponenten eingetragen, die bei einem zeit-

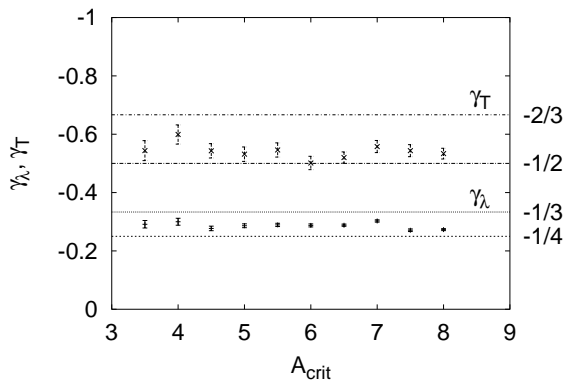


Abbildung 3.2.22: Lineare Anfangsbedingung, γ_λ und γ_T vs. A_{crit} sowie die für die stufenförmige Anfangsbedingung theoretische vorhergesagten Werte von $\gamma_\lambda = -\frac{1}{3}$, $\gamma_T = -\frac{2}{3}$ und die bei einem zeitlich konstanten Gradienten zu erwarten Werte von $\gamma_\lambda = -\frac{1}{4}$, $\gamma_T = -\frac{1}{2}$.

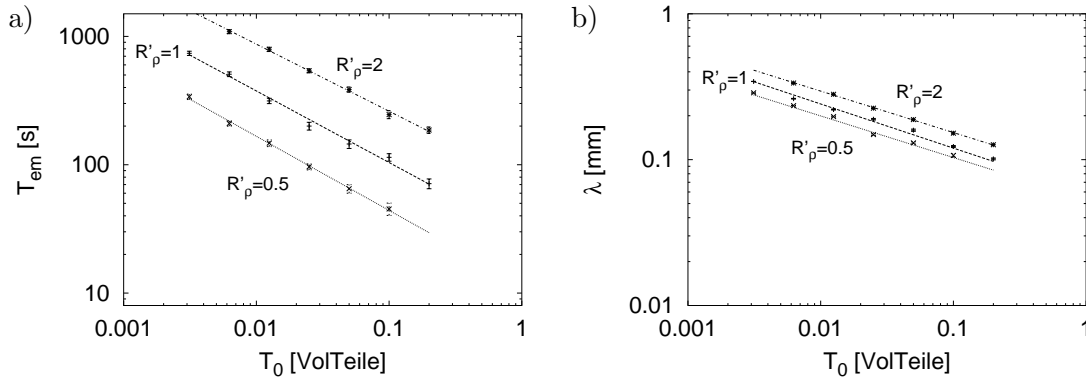


Abbildung 3.2.23: Lineare Anfangsbedingung, $R'_\rho = 0.5$ ($A_{crit} = 8$), $R'_\rho = 1$ ($A_{crit} = 7$) und $R'_\rho = 2$ ($A_{crit} = 6.5$); a) T_{em} vs T_0 ; b) λ vs T_0 .

lich konstanten Gradienten zu erwarten wären. Dies sind $\gamma_T = -\frac{1}{2}$ und $\gamma_\lambda = -\frac{1}{4}$. Die Skalensexponenten der Simulation sind auch mit diesen Werten nicht verträglich.

Der Betrag beider Skalensexponenten ist geringer als der der theoretischen Vorhersage für ein anfänglich stufenförmiges Konzentrationsprofil und größer als der eines zeitlich konstanten Profils. Somit kann gefolgert werden, daß der Konzentrationsgradient langsamer abnimmt als bei einem stufenförmigen Konzentrationsprofil. Dies widerspricht aber der Folgerung einer schnelleren zeitlichen Abnahme des Gradienten (siehe Seite 58), die aus dem zeitlichen Verhalten der Wellenlänge gewonnen wurde (siehe Abb. 3.2.20.b)). Dieser Widerspruch wird an späterer Stelle noch untersucht.

3.2.2.3 Variation des Stabilitätsverhältnis

Um den Einfluß des Stabilitätsverhältnis auf das Verhalten der Wellenlänge und Wachstumszeit zu bestimmen, wird dieses nun variiert. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abb. 3.2.23 dargestellt. Die Ergebnisse bestätigen das zuvor beobachtete Skalerverhalten. Durch Regression ergeben sich für $R'_\rho = 2$ die Skalensexponenten von $\gamma_T = -0.535 \pm 0.014$ und $\gamma_\lambda = -0.294 \pm 0.007$. Für $R'_\rho = \frac{1}{2}$ erhält man $\gamma_T = -0.557 \pm 0.012$ und $\gamma_\lambda = -0.285 \pm 0.009$. Diese Werte sind untereinander und mit den Werten für $R'_\rho = 1$ verträglich. Somit sind diese Skalensexponenten unabhängig vom Stabilitätsverhältnis.

Im Vergleich zu einem anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofil (Abb. 3.2.17 auf S. 55) zeigt sich das gleiche Verhalten bei einer Variation von R'_ρ ; eine Erhöhung von R'_ρ führt zu einer Erhöhung von T_{em} und λ .

3.2.3 Verhalten bei konstanter Zeit

In diesem Kapitel soll untersucht werden, in welchen Zusammenhang die bisherigen Simulationen und Ergebnisse mit dem ursprünglichen $T_z^{-\frac{1}{4}}$ bzw. $T_z^{\frac{1}{2}}$ Skalenverhalten der doppelt-diffusiven Finger Instabilität stehen (siehe S. 13). Bei den vorherigen Ergebnissen wurden verschiedene Simulationen bei gleichen spektralen Amplituden ausgewertet, um hieraus die Wachstumszeit und Wellenlänge zu bestimmen. Im Gegensatz dazu werden in diesem Kapitel nun verschiedene Simulationen zu gleichen Zeitpunkten ausgewertet, um daraus die spektrale Amplitude und die Wellenlänge zu bestimmen.

Zum einen ist diese Auswertung allein schon durch die darin liegende Symmetrie reizvoll, zum anderen verbirgt sich dahinter folgende Überlegung: Näherungsweise ist anzunehmen, daß sich das Konzentrationsprofil der stabilisierenden Substanz T nur durch reine Diffusion, also unter Vernachlässigung doppelt-diffusiver Einflüsse, ausbildet. Bei ansonsten gleichen Parametern folgt also daraus, daß Systeme mit unterschiedlichen Anfangskonzentrationen T_0 zu späteren Zeitpunkten einen zu T_0 proportionalen Konzentrationsgradienten besitzen. Die spezielle Form des anfänglichen Konzentrationsprofils ist hierbei unerheblich für die oben gemachten Näherung; vergleichbar sind jedoch nur in der Form gleiche anfängliche Konzentrationsprofile. Demzufolge werden die nun folgende Auswertungen mit beiden bisherigen Systemen, d. h. den Simulationsreihen mit stufenförmigen und linearen Anfangsbedingungen, durchgeführt.

In Abb. 3.2.24 ist die spektrale Amplitude für verschiedene Konzentrationen bei unterschiedlichen Anfangsbedingungen dargestellt. Der Zeitpunkt der Auswertung T_{Mess} wurde so gewählt, daß die Simulationsreihen mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen sich in vergleichbaren Bereichen der zeitlichen Entwicklung der spektralen Amplitude befinden. Diese Zeitpunkte wurden so gewählt, daß sie T_{em} beim Erreichen des Bodens für $T_0 = 0.05$ VolTeile entsprechen und können an Abb. 3.2.13.a) (Seite 52) und Abb. 3.2.21.a) (Seite 59) abgelesen werden.

Aufgrund der theoretischen Relation

$$A(T_0) \propto \exp\left(const \cdot T_0^{\frac{1}{2}}\right) \quad (3.2.9)$$

(siehe Gl. 3.1.17 auf S. 36) wird die spektrale Amplitude halblogarithmisch gegen $T_0^{\frac{1}{2}}$ aufgetragen. In dieser Darstellung ergibt die theoretische Relation eine Gerade. An der Abbildung 3.2.24.a) erkennt man, daß die Simulationsergebnisse für beide Anfangsbedingungen gut mit der theoretischen Vorhersage übereinstimmen. Abweichungen ergeben sich lediglich für große T_0 . Bei größeren T_0 (die aufgrund der gleichen Anfangsbedingungen größere Gradienten bedingen) besitzen die Systeme eine größere Wachstumsrate. Dadurch befindet sich die spektrale Amplitude dieser Simulation schon im Sättigungsbereich (siehe Abb. 3.2.12.a) auf S. 52 und Abb. 3.2.20.a) auf S. 58), da die Finger den unteren Rand des Systems erreicht haben. Bei einem späterem Meßzeitpunkt treten Abweichungen demzufolge auch schon bei kleineren Werten von T_0 auf.

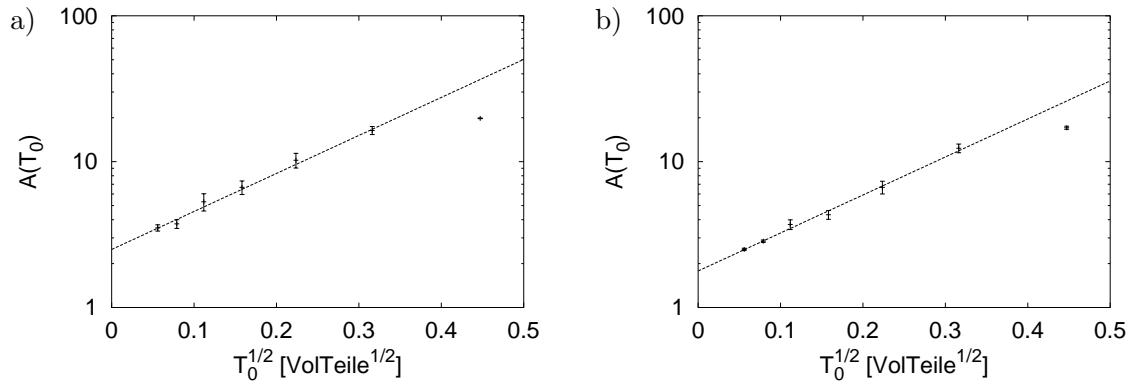


Abbildung 3.2.24: $A(T_0)$ vs. $T_0^{\frac{1}{2}}$ zum Zeitpunkt $T_{Mess} = const$, $R'_\rho = 1$ und numerische Regression gemäß $A(T_0) \propto \exp(const \cdot T_0^{\frac{1}{2}})$. a) Stufenförmige Anfangsbedingung, $T_{Mess} = 90$ s, b) lineare Anfangsbedingung, $T_{Mess} = 150$ s.

An Abbildung 3.2.24.b) ist zu erkennen, daß diese Übereinstimmung auch für ein anfänglich lineares Konzentrationsprofil erzielt wird. Dies ist umso erstaunlicher, als daß in den vorherigen Auswertungen klare Unterschiede zwischen beiden Konzentrationsprofilen auftraten. Diese Abbildungen bestätigen, daß der in dieser Arbeit verwendete Ansatz einer diffusiven Verbreiterung des Höhenprofils brauchbar ist. Würde sich das Konzentrationsprofil durch doppelt-diffusive Konvektion schneller verbreitern als durch Diffusion, würde dies aufgrund des geringeren Gradienten zu einer kleineren Wachstumsrate führen. Dies hätte nach einer gewissen Zeit eine geringere spektrale Amplitude zu Folge. Da sich die dargestellten Systeme aber in stark unterschiedlichen Stadien der Fingerbildung befinden und sich vor dem Erreichen des Randes kein von der theoretischen Vorhersage abweichendes Verhalten in der spektralen Amplitude feststellen läßt, kann dies als eine weitere Bestätigung der Annahme einer diffusiven Verbreiterung des Höhenprofils gesehen werden.

Als ein zweiter Punkt wurden die Wellenlängen bestimmt. Die Ergebnisse der Simulationsdaten bei unterschiedlichen Anfangsbedingungen sind in Abb. 3.2.25.a) und b) dargestellt. Die Messungen wurden zu gleichen Zeitpunkten durchgeführt, um vergleichbare Abweichungen vom anfänglichen Konzentrationsprofil zu erreichen. Weiterhin wird in diesem Diagramm die theoretisch zu erwartenden Wellenlänge dargestellt. Aufgrund der Unhandlichkeit der exakten Formel von Schmitt (Gl. 2.1.19, S. 13) wird die von Stern verwendet: $\lambda \approx \sqrt{2}\pi[\nu D_T/(g\alpha_T T_z)]^{1/4}$ (Gl. 2.1.17 auf S. 13). Für ein anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofil wird zur Berechnung sowohl der maximale Gradient $T_{z,Max}$ (Gl. 3.1.8 auf S. 34) als auch der mittlere Gradient \bar{T}_z (Gl. 3.1.15 auf S. 36) für T_z benutzt. Für Systeme mit einem anfänglich linearen Gradienten wird dieser auch verwendet $T_z = T_0/(2H_{TS})$, da für diese Systeme keine sinnvolle theoretische Näherung existiert, die die zeitliche Entwicklung berücksichtigt. Die tatsächlich vorkommenden Gradienten sind aufgrund der Diffusion geringer.

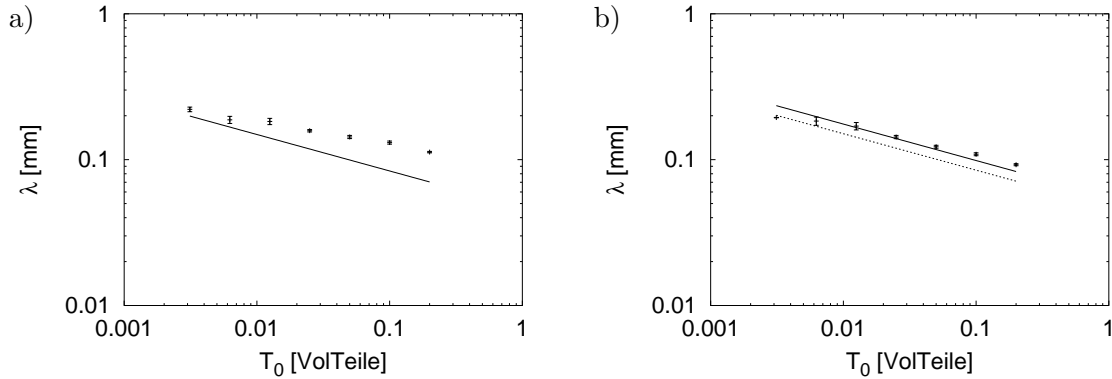


Abbildung 3.2.25: $\lambda(T_0)$ vs T_0 für $T_{Mess} = 90$ s, $R'_\rho = 1$, sowie $\lambda \approx \sqrt{2}\pi[\nu D_T/(g\alpha_T T_z)]^{1/4}$ (Gl. 2.1.17 auf S. 13). a) Lineare Anfangsbedingung, Berechnung von λ mit dem anfänglichen Gradienten; b) Stufenförmige Anfangsbedingung, Berechnung von λ mit dem mittlerem Gradienten \bar{T}_z (—) (Gl. 3.1.15 auf S. 36) und dem maximalen Gradienten $T_{z,Max}$ (···) (Gl. 3.1.8 auf S. 34).

Wie man an Abb. 3.2.25.a) erkennen kann, liefert die theoretische Abschätzung für eine lineare Anfangsbedingung zu kleine Wellenlängen. Dies ist darin begründet, daß die theoretische Abschätzung des Gradienten nur eine Obergrenze für diesen darstellt und der tatsächliche Gradient aufgrund der Zeitentwicklung geringer ist. Somit ist die tatsächliche Wellenlänge größer. Für ein anfängliches stufenförmiges Konzentrationsprofil (Abb. 3.2.25.b)) liefert die Berechnung der Wellenlänge mit dem mittleren Gradienten insgesamt mit den Simulationsergebnissen übereinstimmende Ergebnisse; die mit den maximalen Gradienten liefert zu geringe Wellenlängen.

Bei beiden Anfangsbedingungen ist allerdings eine insgesamt geringere Steigung als in den theoretische Abschätzungen zu beobachten. Dies ist umso bedeutsamer, als das die Ergebnisse der Simulationen ein rein diffusives Höhenprofil in T (siehe Abb. 3.2.6.b), S. 45) und das daraus folgende Verhalten der spektralen Amplitude bestätigen (siehe Abb. 3.2.14.b), S. 53, und Abb. 3.2.24). Aus diesen Tatsachen kann nur der Schluß gezogen werden, daß die theoretische Annahme, daß die Wellenlänge nur vom jeweiligen Gradienten und nicht von seiner Vorgeschichte abhängt (siehe S. 33), nicht allgemein exakt gültig ist. Diese Folgerung wird durch die Simulationsergebnisse des zeitlichen Verhaltens der Wellenlänge gestützt (siehe Abb. 3.2.10, S. 50, und Abb. 3.2.20, S. 58).

3.3 Experimentelle Bestimmung der Wellenlängen

Die in den vorherigen Abschnitten erzielten Ergebnisse für die Wellenlänge λ und die Wachstumszeit T_{em} werden nun mit Experimenten verglichen. Der experimentelle Aufbau und die Durchführung der Experimente ist in Kap. 2.4 auf S. 24 ff. beschrieben. Das bei diesen Meßreihen injizierte Volumen der Mischung beträgt $50 \mu\text{l}$, somit entspricht der Quotient aus Mischungsvolumen und Grundfläche dem der Simulation. Es werden zwei Systeme mit unterschiedlichen Substanzen verwendet, das Tensid/Glyzerin und das Glucose/Glycerid System. Das Tensid/Glyzerin System hat den Vorteil, daß die relevanten Materialkonstanten der Substanzen, wie Dichte und Diffusionskonstanten, bekannt sind (siehe Kap. 2.3.1 auf S. 22). Diese Werte wurden auch in den vorherigen Simulationen verwendet, damit ist ein quantitativer Vergleich möglich.

Die Materialkonstanten der im Glycerid/Glucose System vorhandenen Substanzen hingegen sind nicht bekannt, dies wurde in Kap. 2.3.2 auf S. 24 diskutiert. Demzufolge ist dieses System nicht für einen Vergleich der Werte der Wellenlänge und der Wachstumszeit geeignet. Aufgrund des konstanten Stabilitätsverhältnis eignet sich dieses System aber zu einer Bestimmung des Skalenverhaltens. Desweiteren hat dieses System den Vorteil einer einfachen experimentellen Handhabbarkeit und eines deutlicheren optischen Kontrastes; dies macht es insbesondere für Demonstrationszwecke interessant.

3.3.1 Tensid/Glyzerin System

Die zeitliche Entwicklung eines typischen Experiments in der Aufsicht ist in Abb. 3.3.1 dargestellt. Seitliche Aufnahmen der Experimente werden nicht durchgeführt, da dies aufgrund der Dicke des Systems zu einer optischen Überlagerung von mehreren Finger führen würde und demzufolge wenig aussagekräftig wären. In den Bildern sind für $t < 90$ s nahezu keine Strukturen zu erkennen, für $t \approx 110$ s sind diese hingegen deutlich ausgeprägt. Dieses schnelle Anwachsen der Deutlichkeit der Strukturen entspricht dem der Simulation (siehe Abb. 3.2.9,

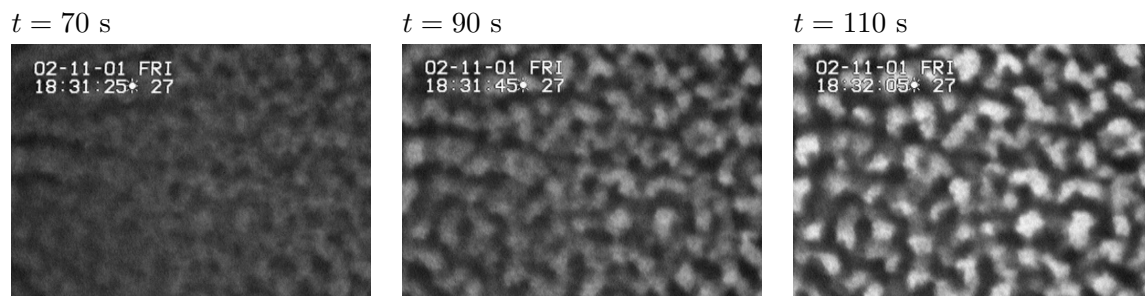


Abbildung 3.3.1: Tensid/Glyzerin System, $R'_\rho = \frac{1}{2}$, $T_0 = 0.0125$ VolTeile. Bildgröße 3.5×2.5 mm. Alle Bilder haben die gleiche Grauwertskalierung bezüglich S .

S. 49, oder Abb. 3.2.19, S. 57) und soll in dem folgenden Abschnitt detaillierter untersucht werden.

3.3.1.1 Zeitliche Entwicklung

In diesem Abschnitt soll die zeitliche Entwicklung eines typischen Systems näher untersucht werden. Um Ungenauigkeiten durch räumliche Inhomogenitäten zu vermeiden und somit eine bessere Datenbasis zu erzielen, wird diese Messung mit einer fixierten Kameraposition durchgeführt. Die Messung wird mit $R'_\rho = 2$ und $T_0 = 0.2$ VolTeile durchgeführt. Die Vorteile dieser Parameterwahl sind experimenteller Natur: Aufgrund der hohen S_0 Konzentrationen entstehen deutlichere Strukturen, deren Auswertung zu einem geringeren Fehler führt. Aufgrund des hohen T_0 Konzentration entstehen kleine Strukturen; durch die große Anzahl an Strukturen wird somit eine bessere Auswertungsstatistik erzielt. Bei diesen Parametern zeigen später diskutierte Messungen keine Abweichungen vom allgemeinen Skalenverhalten, somit kann diese Messung als allgemeingültig angesehen werden.

Die detaillierte zeitliche Entwicklung dieses Systems ist in Abbildung 3.3.2.a) dargestellt; die Fouriertransformierten einiger Bilder sind in Abb. 3.3.2.b) zu erkennen.

In den Bildern ist ein Gradient in x Richtung zu erkennen; dieser wird durch eine inhomogene Beleuchtung verursacht und ist aus technischen Gründen nicht zu vermeiden. Aufgrund seines Verlaufes in x -Richtung hat dieser Gradient in einer 2D-FFT nicht verschwindende Amplitude nur auf der k_x -Achse, d. h. bei $k_y = 0$. Bei nur schwach ausgeprägten Strukturen (z. B. bei $t = 90$ s) würden die Amplituden des Gradienten diejenigen der Struktur dominieren. Somit wäre in der 2D-FFT der zu erwartende Ring (aufgrund der Waben) durch die auf der k_x -Achse liegenden Amplituden (aufgrund des Gradienten) unterdrückt. Aus diesem Grund sind in der 2D-FFT die Werte auf der k_x -Achse nicht dargestellt und werden auch in den folgenden Auswertungen nicht berücksichtigt. Aufgrund der ringförmigen Struktur der Fouriertransformierten hat dieses Vorgehen keinen Einfluß auf die Bestimmung der Wellenlänge. Die Effizienz dieses Vorgehens wird anhand des in Abb 3.3.2 dargestellten Bildes für $t = 90$ s und seiner Fouriertransformierten deutlich. Obwohl der Helligkeitsgradient in dem Bild die wabenförmigen Strukturen deutlich dominiert, ist dies in der Fouriertransformierten nicht zu erkennen.

Anhand der Abbildung 3.3.2.a) ist die zeitliche Entwicklung der Strukturen zu erkennen. Ausgehend von einem nahezu homogenen Zustand steigt die Deutlichkeit der Strukturen rasch an ($t \approx 140$ s). Wie bei den Simulationen ist eine Zunahme der Wellenlänge zu erkennen. Diese Zunahme der Wellenlänge ist bei den Fouriertransformierten in Abb. 3.3.2.b) durch einen sinkenden Radius der kreisförmigen Struktur erkennbar. Im Laufe der Zeit ($t > 160$ s) werden die Strukturen anschließend wieder undeutlicher. Dies ist durch die nach oben wachsenden Finger und deren horizontale Ausbreitung in den oberen Wasserschichten bedingt. Das An-

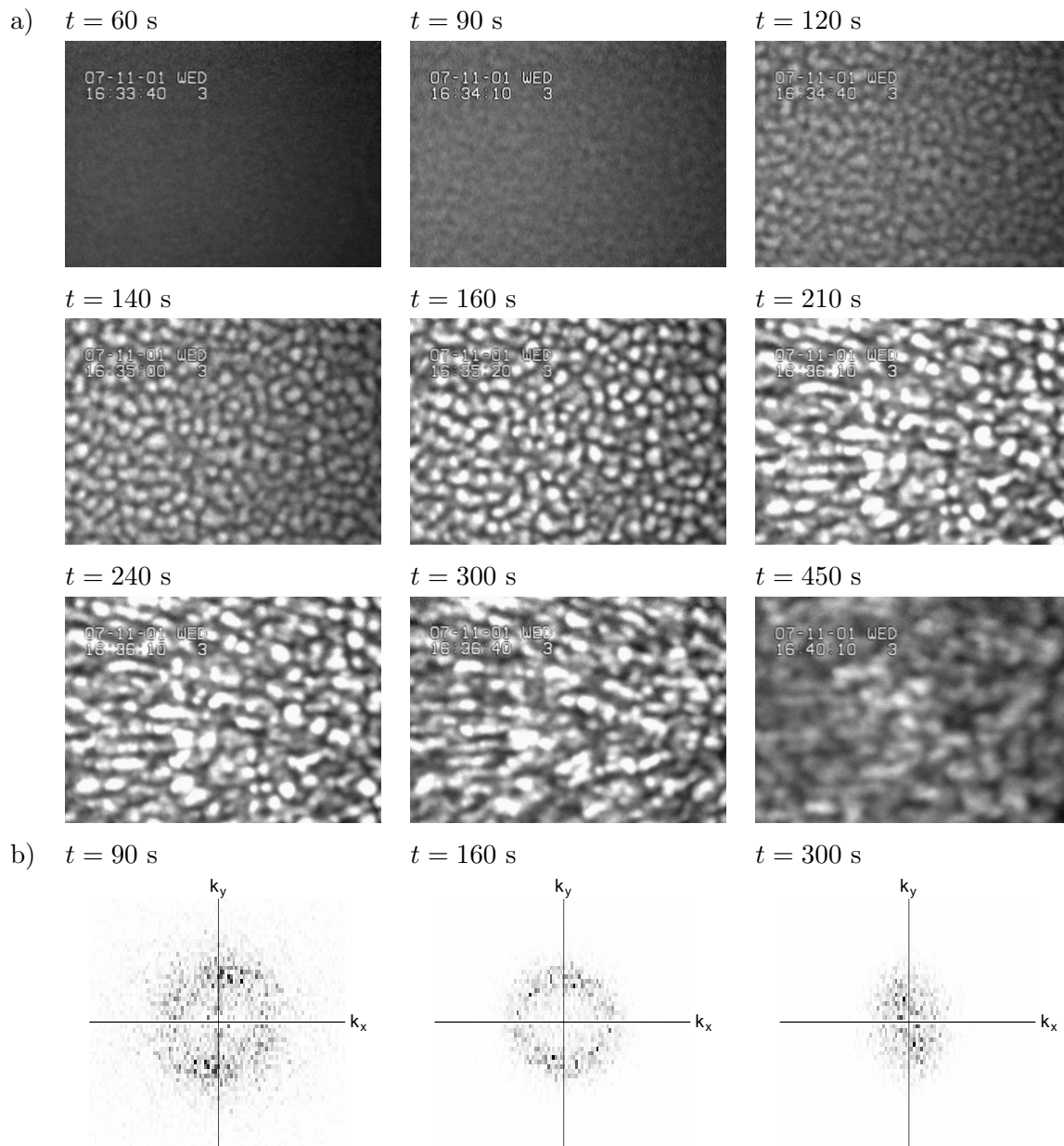


Abbildung 3.3.2: Tensid/Glyzerin System, $R'_p = 2$, $T_0 = 0.2$ VolTeile. a) Zeitliche Entwicklung in der Aufsicht, Bildgröße 3.5×2.5 mm, alle Bilder haben die gleiche Grauwertskalierung bezüglich S ; b) Fouriertransformierte der mittleren Spalte aus a).

steigen und Absinken der Deutlichkeit ist anhand der Fouriertransformierten an der radialen Verbreitung der kreisförmigen Struktur zu erkennen.

Die Zunahme der Wellenlänge soll nun anhand dieses Experimentes quantitativ analysiert werden. Die Wellenlänge ergibt sich aus dem gewichteten Mittel des radialen Wellenzahlvektors, der Fehler der Wellenlänge ergibt sich aus der Standardabweichung. Das Ergebnis

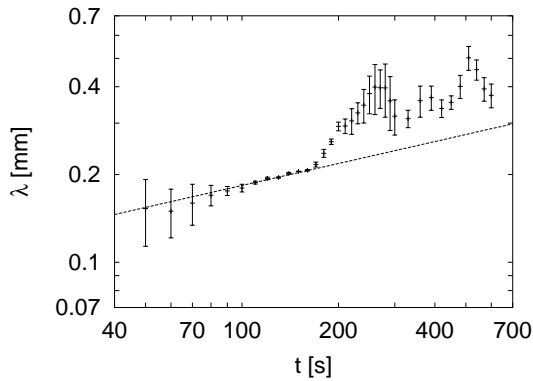


Abbildung 3.3.3: Tensid/Glyzerin System, $R'_\rho = 2$, $T_0 = 0.2$ VolTeile. λ vs t sowie $\lambda \propto t^{1/4}$. Die Werte wurden aus dem in Abb. 3.3.2 dargestellten Experiment extrahiert.

dieser Auswertung ist in Abb. 3.3.3 dargestellt. Aufgrund des nichtlinearen Verlaufs in der doppel-logarithmischen Darstellung erkennt man, daß sich die Wellenlänge nicht über den ganzen Meßzeitraum gemäß einem Skalengesetz verhält. Für kleine Zeiten ($t \lesssim 170$ s) kann das Verhalten der Wellenlänge jedoch durch $\lambda \propto t^{1/4}$ empirisch beschrieben werden. Dies wurde zuvor schon in den Simulationen mit einem anfänglich linearen Konzentrationsprofil beobachtet (siehe Abb. 3.2.20 auf S. 58). Diese Zunahme der Wellenlänge entspricht der qualitativen Beschreibung in [53] mit dem Salz/Zucker Systems.

Für größere Zeiten ist zunächst ein schnelleres Wachstum der Wellenlänge zu beobachten, welches anschließend stark schwankt. Die Grenzen dieses Bereiches wachsen jedoch mit der gleichen Relation wie zuvor. Der starke Anstieg wird durch einen nicht perfekt vertikalen Aufstieg der Finger verursacht, die somit die Wabenstruktur überlagern. Dieses Verhalten der Finger wird durch experimentell nicht zu vermeidende Strömungen verursacht. Anschaulich wird dies an der undeutlicher werdenden Wabenstruktur bei $t \approx 210$ s deutlich. Gleichzeitig dient das Auftreten dieses Effektes als eine Kontrolle der obere Grenze der Wachstumszeit. Die für große Zeiten ($t \gtrsim 300$ s) zu beobachtenden undeutlichen Strukturen mit einer großen Wellenlänge könnten dadurch verursacht werden, daß sich die Finger nach Erreichen der Wasseroberfläche dort horizontal ausbreiten. Dieser Effekt wird nicht weiter untersucht.

3.3.1.2 Konzentrationsabhängigkeit

Im Folgenden wird nun die Konzentrationsabhängigkeit der Wellenlänge und Wachstumszeit bestimmt, um diese mit den theoretischen Überlegungen und den Simulationen zu vergleichen. Die aufgrund der theoretischen Überlegungen und den Simulationen zu erwartende Abnahme der Wellenlänge und Wachstumszeit bei zunehmender Konzentration wird anschaulich durch Abb. 3.3.4 bestätigt. Bei einer Beobachtung der in dieser Abbildung dargestellten Experimente zu gleichen Zeitpunkten wären bei $t = 120$ s in Abb. 3.3.4.a) (noch) keine Strukturen, bei $t = 300$ s wären in Abb. 3.3.4.b) keine Strukturen (mehr) zu erkennen.

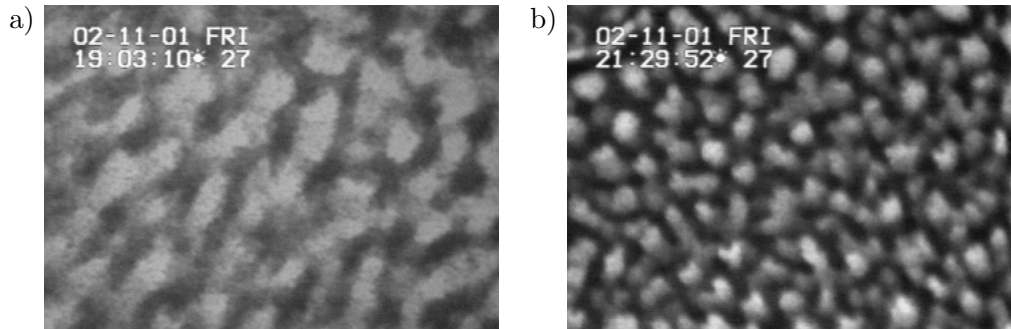


Abbildung 3.3.4: Tensid/Glyzerin System, $R'_\rho = 1$. a) $T_0 = 0.00625$ VolTeile, $t = 300 \text{ s} \approx T_{em}$; b) $T_0 = 0.1$ VolTeile, $t = 120 \text{ s} \approx T_{em}$. Bildgröße $3.5 \times 2.5 \text{ mm}$.

Die Wellenlänge und Wachstumsdauer wird bestimmt, sobald die Intensität an den hellen Stellen der Wabenstruktur auf 95% der Intensität ohne Mischung angestiegen ist. Diese Vorgehensweise soll sicherstellen, daß die Auswertung kurz vor dem Erreichen des Bodens durch die Finger geschieht. Damit geschieht die Auswertung zu einem vergleichbaren Zustand des Systems wie bei den Simulationen; dieser Aspekt wurde auf S. 52 behandelt. Dieses Vorgehen hat den weiteren Vorteil, daß die Strukturen sehr deutlich sind und sich somit ein gutes Signal/Rausch Verhältnis für die weitere Auswertung ergibt. Ein den Simulationen entsprechendes Vorgehen anhand der spektralen Amplitude war aufgrund des in den experimentellen Bildern vorhandenen Rauschens nicht möglich, insbesondere bei noch nicht deutlich ausgeprägten Strukturen. Demzufolge ist es auch nicht möglich, wie in den Simulationen experimentelle Meßreihen bei unterschiedlichen spektralen Amplituden, d. h. Deutlichkeiten der Strukturen auszuwerten. Die Wachstumsdauer T_{em} ergibt sich aus der Differenz zwischen dem Meßzeitpunkt und dem Ende der Injektion. Dies erfolgt im Unterschied zu der vorherigen Untersuchung [18], bei der T_{em} ab dem Erreichen des Randes des Gefäßes definiert wurde. Diese Änderung ist notwendig, da in später dargestellten Simulationen mit Injektion die Dauer der Ausbreitung der Mischung aufgrund der Systemgröße nicht mit dem Experiment übereinstimmt. Da später die Ergebnisse der Simulationen und der Experimente miteinander verglichen werden, ist die hier verwendete einheitliche Definition von T_{em} notwendig. Der sich daraus ergebende Unterschiede im Skalensexponenten von T_{em} zu [18] liegt jedoch innerhalb der Fehlergrenzen. Die Wellenlänge λ wurde wie in der Simulation aus einer 2D-FFT gewonnen.

Um experimentelle Meßungenauigkeiten zu minimieren, wurde jeder Datenpunkt aus 3 jeweils neu erstellten Lösungen gewonnen, die dann in 5 Versuchen verwendet wurden. Der komplette zeitliche Verlauf der Versuche wurde per CCD Kamera aufgenommen und anschließend digitalisiert. Anhand dieser Bilder konnte dann mit dem oben angeführten Kriterium bestimmt werden, welche Bilder für die weitere Auswertung verwendet werden. Aus den verschiedenen Auswertungsergebnissen wurde dann der Mittelwert und die Standardabweichung bestimmt.

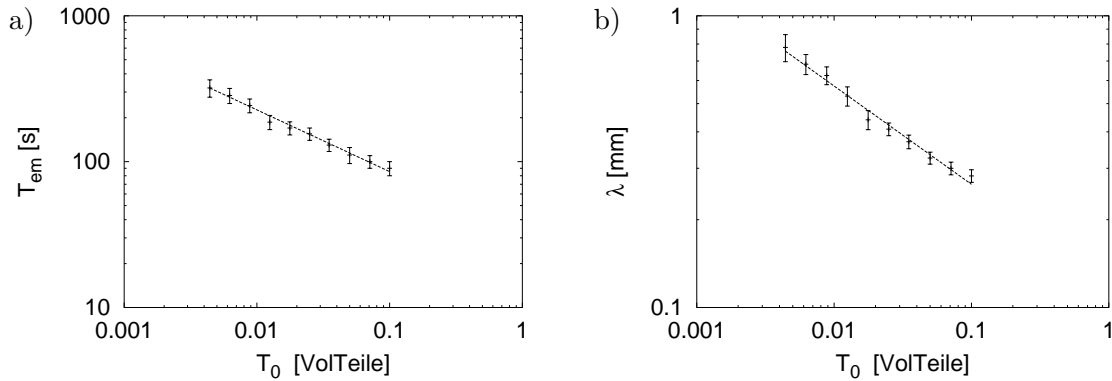


Abbildung 3.3.5: Tensid/Glyzerin System, $R'_\rho = 1$. a) T_{em} vs T_0 , b) λ vs T_0 . Die Werte der Ausgleichsgeraden können dem Text entnommen werden.

Die Wellenlänge λ und die Wachstumszeit T_{em} in Abhängigkeit von den anfänglichen Konzentrationen des Tensid/Glyzerin Systems sind in Abb. 3.3.5 dargestellt. Man erkennt deutlich, daß sich sowohl λ als auch T_{em} unabhängig von R'_ρ gemäß einem Skalengesetz verhalten. Eine numerische Bestimmung der Skalenexponenten lieferte Exponenten für die Wachstumszeit T_{em} von $\gamma_T = -0.423 \pm 0.029$ und für die Wellenlänge von $\gamma_\lambda = -0.337 \pm 0.023$.

Diese Skalenexponenten weichen deutlich von denen der theoretischen Vorhersage und den Simulationen mit einem anfänglich stufenförmigen Konzentrationsprofil ab; sie liegen allerdings in der Nähe der Werte für ein anfänglich lineares Konzentrationsprofil. Um die experimentell bestimmten Exponenten zu überprüfen, werden diese Messungen nun für andere Stabilitätsverhältnisse durchgeführt.

3.3.1.3 Variation des Stabilitätsverhältnis

Um zu überprüfen, inwieweit die bisherigen Skalenexponenten des Tensid/Glyzerin vom Stabilitätsverhältnis abhängen, wird dieses nun variiert. Dabei wurden die gleichen Stabilitätsverhältnisse wie bei den Simulationen verwendet, d.h. $R'_\rho = \frac{1}{2}$ und 2. Die Tensid Konzentrationen S_0 wird zwischen 0.003125 und 0.1 VolTeile variiert, dies ist durch die Wahl des Systems bedingt (siehe Abschnitt 2.3.1 auf S. 22 ff). Für diese Parameter wird die Wellenlänge λ und Wachstumszeit T_{em} gemessen, die Vorgehensweise entspricht der der vorherigen Messungen. Das Ergebnis dieser Messungen ist in Abbildung 3.3.6 dargestellt. Für alle untersuchten Stabilitätsverhältnisse erkennt man einen Verlauf gemäß einem Skalengesetz. Die geringfügigen Abweichungen vom Skalenverhalten für $T_0 = 0.05$ VolTeile bei $R'_\rho = \frac{1}{2}$ könnten dadurch bedingt sein, daß das Diffusionsgesetz in der einfachen Form (Gl. 2.1.4 auf S. 10) aufgrund der hohen S_0 Konzentration in diesem Bereich nicht mehr gültig ist (siehe z. B. §59 in [19]); dies erscheint insbesondere unter Berücksichtigung der Größe und Form der Tensidmizellen plausibel. Aus diesem Grunde wird dieser Wert bei $T_0 = 0.05$ VolTeile und $R'_\rho = \frac{1}{2}$ in der

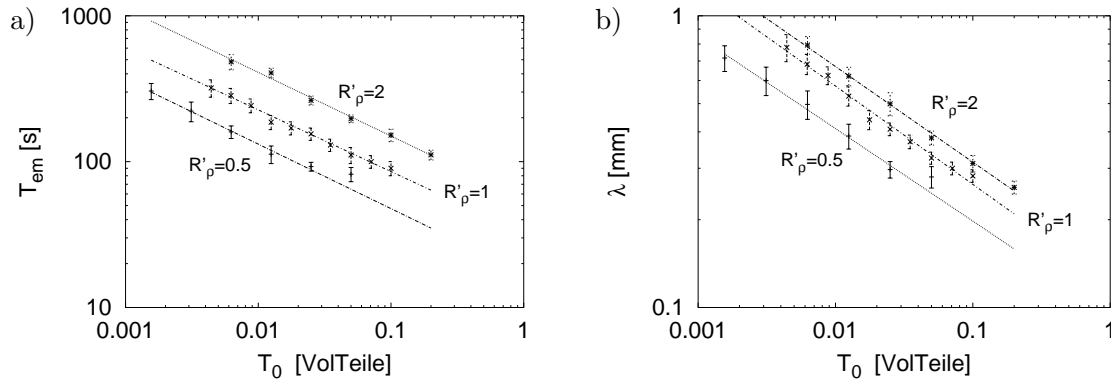


Abbildung 3.3.6: Tensid/Glyzerin System, a) T_{em} vs T_0 , b) λ vs T_0 . Die Werte der Ausgleichsgeraden können dem Text entnommen werden.

weiteren Auswertung auch nicht berücksichtigt. Die Tatsache, daß diese Abweichungen jedoch nicht bei allen Stabilitätsverhältnissen gemessen wurden, bleibt unerklärt und kann nur als experimentelle Ungenauigkeit gewertet werden.

Um das Skalenverhalten zu quantifizieren, wird eine doppelt-logarithmische Regression durchgeführt. Diese liefert für $R'_\rho = 2$ die Skalenexponenten für die Wachstumszeit von $\gamma_T = -0.436 \pm 0.019$ und für die Wellenlänge von $\gamma_\lambda = -0.327 \pm 0.012$. Für $R'_\rho = \frac{1}{2}$ erhält man $\gamma_T = -0.442 \pm 0.021$ für die Wachstumszeit und für die Wellenlänge $\gamma_\lambda = -0.318 \pm 0.017$. Diese Exponenten stimmen im Rahmen der Meßgenauigkeit mit den Werten für $R'_\rho = 1$ überein. Diese Unabhängigkeit der Skalenexponenten vom Stabilitätsverhältnis entspricht den theoretischen Erwartungen.

In dem vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, daß die anfängliche Form des Konzentrationsprofils einen Einfluß auf das Skalenverhalten hat. Somit kann der Schluß gezogen werden, daß ein anfänglich stufenförmiges Konzentrationsprofil im Experiment nicht vorliegt. Die Werte der experimentellen Skalenexponenten liegen jedoch in der Nähe der Simulationsergebnisse für ein anfänglich lineares Konzentrationsprofil. Dies legt die Vermutung nahe, daß dies den Experimenten besser entspricht.

Die Übereinstimmung der Skalenexponenten zwischen dem Experiment und den Simulationen wird nun anhand von Experimenten mit einem anderem System überprüft.

3.3.2 Glycerid/Glucose System

Um zu überprüfen, inwieweit die vorherigen Ergebnisse durch die spezielle Wahl des Systems bedingt sind, werden nun die vorherigen Messungen auf die selbe Art mit dem Glycerid/Glucose System durchgeführt. Aufgrund der speziellen Gegebenheiten des Systems (siehe Seite 24) ist das Stabilitätsverhältnis bei diesem System grundsätzlich immer konstant, der konkrete Wert ist jedoch unbekannt. Demzufolge werden die Meßgrößen auch in Abhängigkeit

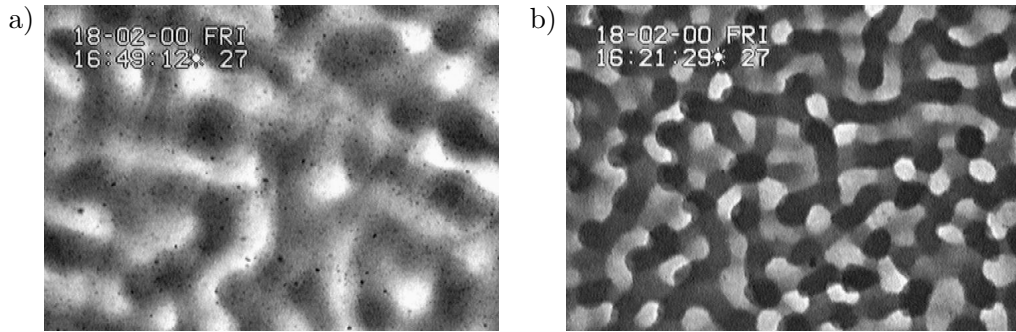


Abbildung 3.3.7: Glycerid/Glucose System, a) $C_0 = 0.015$ MassTeile, $t = 360 \text{ s} \approx T_{em}$, b) $T_0 = 0.24$ MassTeile, $t = 80 \text{ s} \approx T_{em}$. Bildgröße $3.5 \times 2.5 \text{ mm}$.

von der anfänglichen Gesamtkonzentration C_0 der Mischung bestimmt; diese ist gegebenenfalls proportional zu T_0 .

Anhand der Abb. 3.3.7 ist zu erkennen, daß eine Erhöhung der Konzentration bei diesem System erwartungsgemäß zu einer Abnahme der Wellenlänge und der Wachstumszeit führt. Die quantitative Untersuchung zeigt für T_{em} und λ ein Verhalten entsprechend einem Skalengesetz (siehe Abb. 3.3.8). Eine numerische Auswertung der Meßdaten ergibt Skalensexponenten von $\gamma_T = -0.514 \pm 0.028$ und $\gamma_\lambda = -0.386 \pm 0.017$. Diese Werte liegen über denen des Tensid/Glyzerin Systems. Die fehlende Übereinstimmung kann darauf zurückgeführt werden, daß in dem Glycerid/Glucose System mehr als zwei Substanzen vorhanden sind. Abhängig von ihren jeweiligen Konzentrationen, Dichten und Diffusionskonstanten, können diese Substanzen einen Einfluß auf die Strukturbildung haben, so daß keine *doppelt*-diffusive Konvektion im eigentlichen Sinne mehr vorliegt. Aus diesem Gründen wird dieses System nicht weiter quantitativ untersucht. Nichtsdestotrotz liegen die gemessenen Skalensexponenten zumindest in der Nähe von denen des Tensid/Glyzerin Systems. Dies legt die Vermutung nahe, daß das bisher beobachtete Skalenverhalten zumindest nicht durch die spezielle Wahl der beteiligten

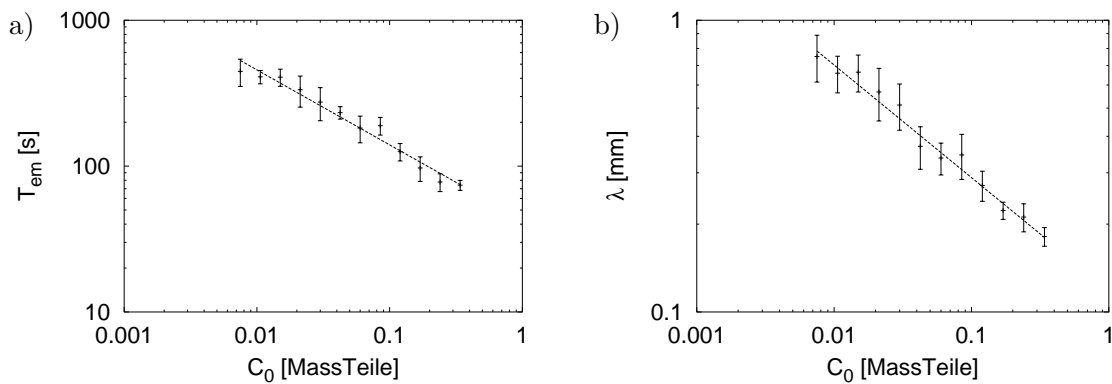


Abbildung 3.3.8: Glycerid/Glucose System, $R'_p = const.$ a) T_{em} vs C_0 , b) λ vs C_0 . Die Werte der Ausgleichsgeraden können dem Text entnommen werden.

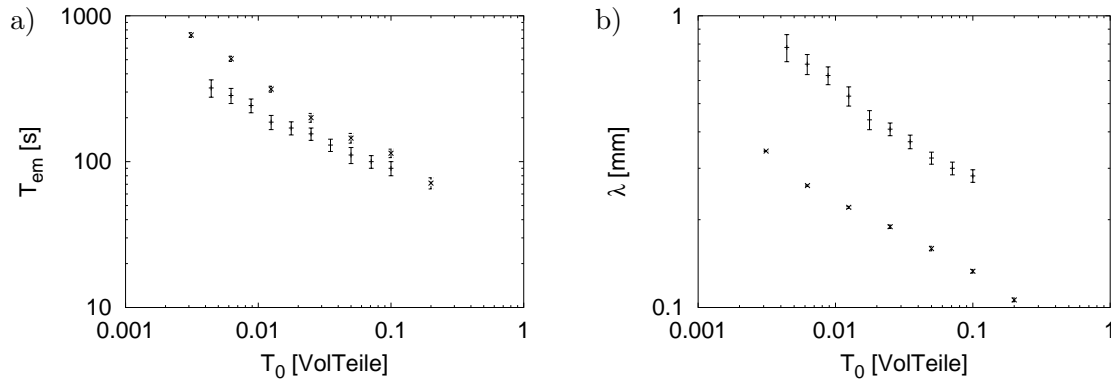


Abbildung 3.3.9: Tensid/Glyzerin System (+) im Vergleich mit den Simulationsergebnissen (\times) für eine anfänglich lineares Konzentrationsprofil, $R'_\rho = 1$.

Stoffe bedingt ist.

3.3.3 Vergleich von Simulationen und Experimenten

Ein Vergleich der aus den Tensid/Glyzerin Experimenten bestimmten Wellenlängen mit denen aus den Simulationen für ein anfänglich lineares Konzentrationsprofil ist in Abb. 3.3.9 dargestellt. Die dargestellten Werte entsprechen denen aus Abb. 3.3.5 (Seite 69) und Abb. 3.2.21 (Seite 59). Anhand der Abbildungen ist die zuvor schon erwähnte Nähe der Skaleneponenten der Wellenlängen und Wachstumszeiten ersichtlich. Insbesondere in der Wellenlänge zeigt sich jedoch ein großer Unterschied zwischen Simulation und Experiment. Dies ist umso bedeutsamer, als daß die in der Simulation verwendeten Materialkonstanten denen des Tensid/Glyzerin Systems entsprechen.

Da die Wellenlänge und Wachstumszeit im wesentlichen durch den Konzentrationsgradienten bestimmt werden, ist in den bisherigen, ohne weitere Begründung eingeführten Annahmen über den anfänglichen Konzentrationsgradienten in der Simulation die Hauptursache für die bestehenden Abweichungen zu sehen. Dies wird in dem nachfolgenden Kapitel eingehender begründet.

3.4 Simulationen mit Injektion

In dem vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, daß das Skalenverhalten der Wellenlänge und der Wachstumszeit im Experiment und in den bisherigen Simulationen vergleichbar ist. Eine quantitative Übereinstimmung konnte jedoch nicht erzielt werden. Wie zuvor schon dargelegt wurde, hat das anfängliche Konzentrationsprofil einen deutlichen Einfluß auf die Wellenlänge und Wachstumszeit. Das in den Simulationen verwendete anfängliche Konzentrationsprofil hatte aus meßtechnischen Gründen keine experimentelle Grundlage. Aus diesem Grund werden die Simulationen nun erweitert, um das experimentelle System realitätsgetreuer nachzubilden. Da das anfängliche Konzentrationsprofil im Experiment im wesentlichen durch den Injektionsprozess gegeben ist, wird nun in den folgenden Simulationen diese Injektion modellhaft nachgebildet.

Das simulierte System hat eine Größe von $(10 \times 10 \times 3) \text{ mm}^3$ bei einer Gitterschrittweite von $4 \cdot 10^{-2} \text{ mm}$. Dies entspricht $250 \times 250 \times 75 \approx 5 \cdot 10^6$ simulierten Kontrollvolumina. Daraus resultiert ein permanenter Speicherplatzbedarf von $\approx 900 \text{ MB}$ für eine laufende Simulation. Dies ist die obere Grenze an Speicherplatz der Rechner, die permanent zur Verfügung stehen. Die Anzahl der Kontrollvolumina und der Gitterschrittweite stellt dabei, unter der Randbedingung des maximal zur Verfügung stehenden Speicherplatzes, einen Kompromiß zwischen einem möglichst realitätsgetreuen System und einer möglichst hohen numerischen Genauigkeit dar. Die benutzte Gitterschrittweite von $4 \cdot 10^{-2} \text{ mm}$ erweist sich als numerisch stabil. Die Geometrie des simulierten System ist im Gegensatz zum Experiment quadratisch. Die Simulation eines zylinderförmigen Systems wie im Experiment erwies sich aufgrund der Randbedingung und der rechteckigen Gittergeometrie als nicht durchführbar. Die Umsetzung einer polygonalen Gittergeometrie ist aufgrund der großen Unterschiede zu einer rechteckigen Gittergeometrie sehr umfangreich (siehe z. B. [8]) und erscheint als wenig erfolgssteigernd. Als Randbedingung wird im Gegensatz zu den vorherigen Simulationen ein geschlossenes System simuliert. Dies entspricht dem Experiment. Der Einfluß des Randes auf die Strukturbildung ist aufgrund der Größe des gesamten Systems gegenüber einer Wellenlänge und der Unregelmäßigkeit der Wabenstruktur vernachlässigbar.

Die Injektion wird modelliert, indem während des Injektionszeitraums in der Mitte des Systems ein zylinderförmiges Gebiet mit extern fixierten Konzentrationen (T_0 und S_0) und Geschwindigkeiten $\vec{v} = (0, 0, -v_z)$ verwendet wird. Dieses zylinderförmige Gebiet hat einen Radius von 0.4 mm, eine Höhe von 1 mm und beginnt 0.5 mm über dem Boden. Den Kontrollvolumina, deren Volumen von der Zylinderoberfläche geschnitten wird, wird eine anteilige Konzentration zugewiesen. Dies soll eine möglichst kreisförmige Injektion garantieren. Außerhalb dieses zylinderförmigen Gebietes wurde während des Injektionszeitraums ein hohlzylinderförmiges Gebiet (siehe z. B. [5], Kap 2.6.2.4) mit einer Dicke von 0.16 mm verwendet. Die Geschwindigkeiten und Konzentrationen dieses Gebietes werden während des Injektionszeit-

raums auf 0 gesetzt. Diese beiden Gebiete sollen die Injektionspipette modellieren. Im Inneren strömt die Mischung nach unten, der Rand verhindert, daß der innere Bereich weder durch Diffusion noch durch Strömung einen direkten Einfluß auf die seitlichen Bereiche ausübt. Dies entspricht dem Glas der Injektionspipette im Experiment. Nach dem Injektionszeitraum werden die Konzentrationen in beiden Gebiete mit Null initialisiert und das gesamte System verhält sich gemäß den simulierten Gleichungen. Dies entspricht dem Entfernen der Pipette im Experiment.

Der innere Radius (0.4 mm) und Injektionszeitraum von 20 s entsprechen den Experimenten. Aus diesen Werten ergibt sich die räumlich mittlere Injektionsgeschwindigkeit von ≈ 1.6 mm/s, da der Quotient aus injizierter Mischungsmenge und Grundfläche mit dem experimentellen Wert übereinstimmt. Damit hätte die Mischung bei einer homogenen, stufenförmigen Verteilung mit den anfänglichen Konzentrationen eine Höhe von 0.16 mm; dies entspricht den vorherigen Simulationen. Die Höhe des gesamten Systems ist mit 3 mm größer als die der vorherigen Simulation und vergleichbar mit dem Experiment. Diese im Vergleich zu den vorherigen Simulationen große Höhe wird gewählt, da der obere und untere Rand zu einer Abbremsung der Strömung führt und bei diesen Simulationen gerade dieser Einfluß der Strömung auf das Konzentrationsprofil berücksichtigt werden soll.

Ein anfängliches Rauschen wurde wie in den vorherigen Simulationen modelliert (siehe Seite 41). Bei diesem Simulationsmodell ist allerdings der Einfluß des anfänglichen Rauschens in den Strömungsvektoren auf die Verteilung von T und S geringer, da zu Beginn noch keine Substanzen T und S vorhanden sind. Um dies zu kompensieren, wurde während des Injektionszeitraums die Injektionsgeschwindigkeit für jeden Zeitschritt zufällig aus $[v_z - \epsilon_z, v_z + \epsilon_z]$ gewählt. Hierbei ist v_z die zuvor angegebene Injektionsgeschwindigkeit, die Wert der maximalen Rauschamplitude ϵ_z entspricht dem der vorherigen Simulationen ($\epsilon_z = 1 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}}{\text{s}}$). Alle weiteren Parameter der Simulation entsprechen denen der vorherigen Simulationen.

Ein typischen Zeitverlauf dieser Simulationen ist in Abb. 3.4.1 dargestellt. Bei $t = 15$ ist das zylinderförmige Injektionsgebiet in der Aufsicht in der Mitte als schwarzer Kreis zu erkennen und in dem seitlichen Schnitt als Schwarzes Rechteck in der Mitte. Während der Injektion breitet sich die Mischung am Boden kreisförmig seitlich aus. Die seitliche Ausbreitung führt zu einem inhomogenen Konzentrationsprofil, dies ist an dem seitlichen Schnitt für $t = 15$ s zu erkennen. Nach dem Ende des Injektionszeitraums breitet sich die Mischung aufgrund der durch die Injektion vorhandenen Geschwindigkeit und ihrer höheren Dichte weiterhin radial aus; dies ist in der Abbildung für $t = 60$ s dargestellt. Dies Strömung führt zu einem nahezu Mischungsfreien Bereich in der Mitte des Systems. Dieser Bereich wird später durch eine gravitationsbedingte geringe Gegenströmung aber wieder durch Mischung bedeckt. Im Laufe der Zeit klingt die radiale Strömung durch Energiedissipation aufgrund von innerer Reibung und den Ränder des Systems ab. Bei $t = 120$ s ist der ganze Boden nahezu homogen mit Mischung bedeckt. Bei $t = 240$ s erkennt man deutlich die ausgebildeten wabenförmigen

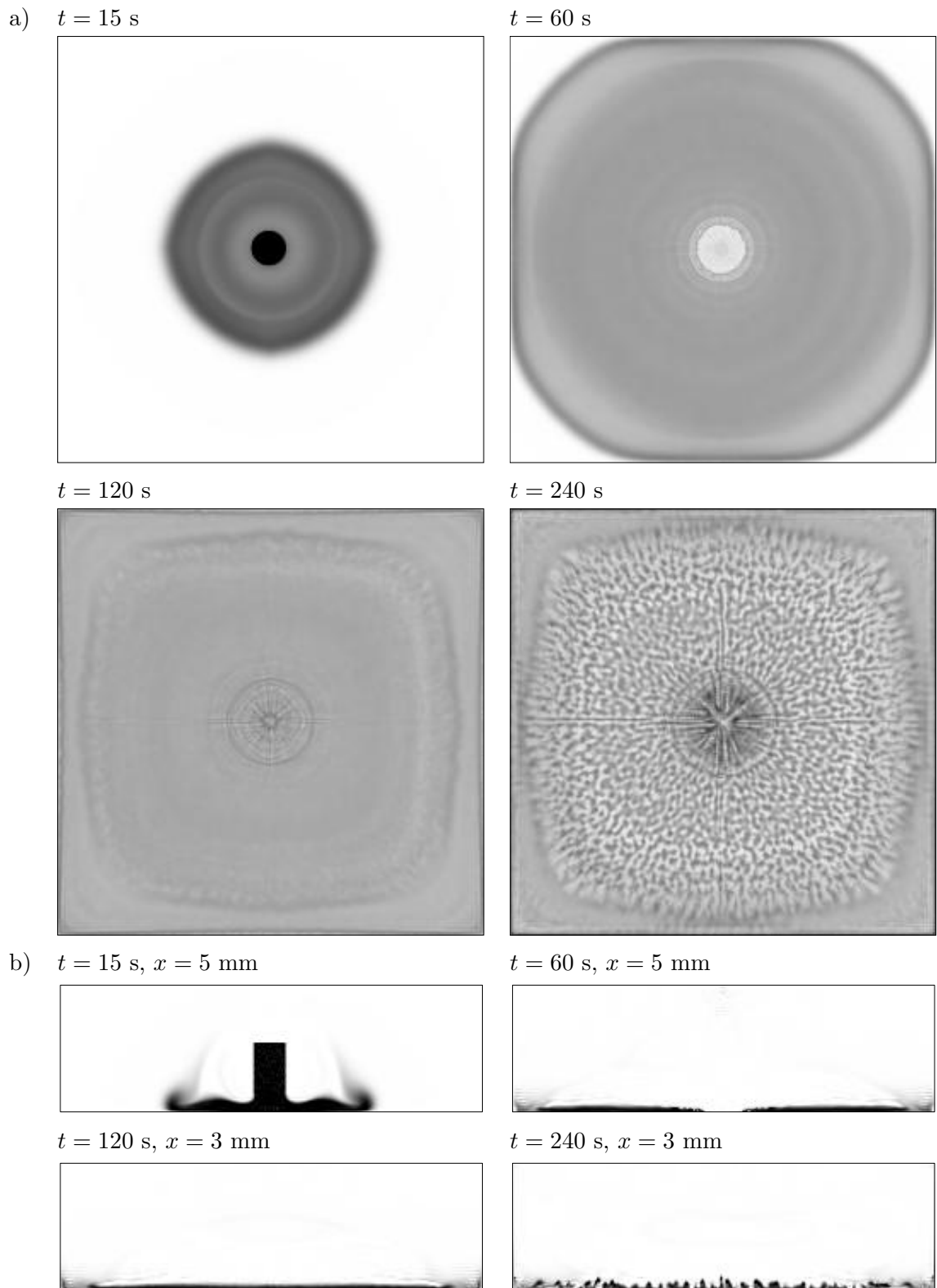


Abbildung 3.4.1: Simulation mit Injektion, $T = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, Bildgröße 10×10 mm. a) Aufsichten zu den angegebenen Zeiten; b) Seitliche Schnitte zu den angegebenen Zeiten und Positionen.

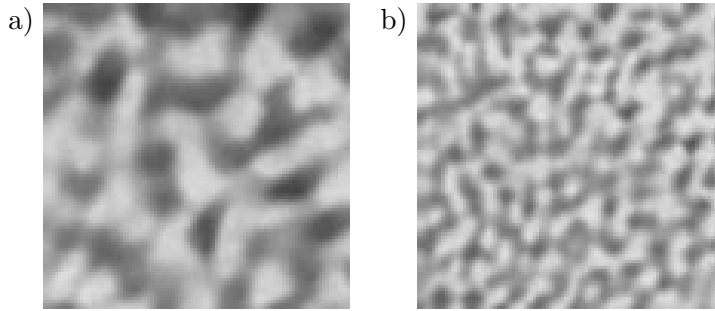


Abbildung 3.4.2: Ausschnitte der Simulationen mit Injektion, $R'_\rho = 1$. a) $T_0 = 0.00625$ VolTeile bei $t = 400 \text{ s} \approx T_{em}$; b) $T_0 = 0.05$ VolTeile bei $t = 200 \text{ s} \approx T_{em}$ (Ausschnitt aus der in Abb. 3.4.1 dargestellten Simulation). Bildgröße $2 \times 2 \text{ mm}$.

Strukturen der doppelt-diffusiven Konvektion. Diese Strukturen sind im Randbereich weniger deutlich ausgeprägt; dies ist zum einen durch das spätere Eintreffen der Mischung in diesem Bereich bedingt und zum anderen durch auftretenden Verwirbelungen aufgrund des Auftreffens der Mischung auf den Rand. Dies ist an dem seitlichen Schnitt bei $t = 120 \text{ s}$ zu erkennen. Diese Verwirbelungen führen zu einem lokal niedrigerem Konzentrationsgradienten, der zu einer größeren Wachstumszeit führt.

Zwei Simulationen mit unterschiedlichen Anfangskonzentration sind im Detail in Abbildung 3.4.2 dargestellt. Zu erkennen ist eine im Vergleich zu den vorherigen Simulationen (siehe Abb. 3.2.11, S. 51, oder Abb. 3.2.19, S. 57) unregelmäßigere Wabenstruktur. Dies ist durch die Injektion bedingt und auch bei den experimentellen Aufnahmen zu erkennen (siehe Abb. 3.3.4, Seite 68). Weiterhin ist anhand dieser Bilder eine größere Wellenlänge und Wachstumszeit als in den vorherigen Simulationen zu erkennen. Da diese vom Konzentrationsgradienten abhängen, wird nun der vertikale Verlauf der Konzentration untersucht.

Hierzu wird die horizontal gemittelten Konzentration \bar{T} sowie die dazugehörige Standardabweichung σ_T verwendet; dieses Vorgehen entspricht dem in Abb. 3.2.6 (Seite 45). Die Werte werden aus einer Simulation für jede untersuchte Anfangsbedingung bestimmt; die Auswertung findet zum Zeitpunkt T_{em} statt. T_{em} liegt für die stufenförmige Anfangsbedingung bei $\approx 80 \text{ s}$, für die lineare bei $\approx 120 \text{ s}$ und für die Simulation mit Injektion bei $\approx 180 \text{ s}$ (die Bestimmung dieses Wertes erfolgt an späterer Stelle).

Das Ergebnis dieser Auswertung ist in Abbildung 3.4.3 dargestellt. Bei der stufenförmigen Anfangsbedingung ist ein stärkerer Abfall der Konzentration zu beobachten als bei der linearen, der wiederum größer ist als der der Simulation mit Injektion. Der geringere Konzentrationsgradient T_z wird bei einer Injektion durch die auftretenden Verwirbelungen verursacht, dies ist an den seitlichen Schnitten in Abb. 3.4.1 zu erkennen. Dieses Verhältnis der Konzentrationsprofile bleibt bei einer Auswertung zu gleichen Zeitpunkten unverändert. Dies erklärt die unterschiedlichen Wellenlängen bei unterschiedlichen Anfangsbedingungen. Desweiteren erkennt man bei der Simulation mit Injektion eine größere Standardabweichung σ_T . Da diese, wie \bar{T}_z , aus den Daten einer Simulation bestimmt wird, sind somit wesentlich größere lokale Schwankungen in T erkennbar. Da die schneller diffundierende Substanz T nahezu keine fingerartigen Strukturen bildet (siehe Abb. 2.2.2 auf S. 19), sind diese lokale Inhomogenitäten

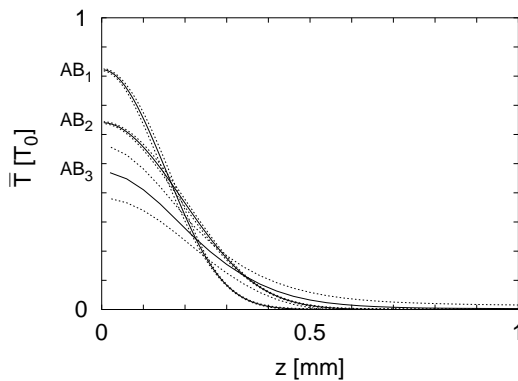


Abbildung 3.4.3: Horizontal gemittelte Konzentration \bar{T} sowie $\bar{T} \pm \sigma_T$ in Abhängigkeit von der Höhe z zum Zeitpunkt T_{em} für unterschiedliche Anfangsbedingungen. AB₁: stufenförmige, AB₂: lineare Anfangsbedingung sowie AB₃: Simulation mit Injektion, die Werte \bar{T} für $z > 1$ mm sind nicht dargestellt. $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$.

durch die Injektion bedingt. Dies bewirkt die beobachteten unregelmäßigeren Strukturen.

Die in Abb. 3.4.2 beobachtbare Abnahme der Wellenlänge und Wachstumszeit bei einer Zunahme der anfänglichen Konzentration soll nun quantitativ untersucht werden. Hierzu werden Simulationen mit unterschiedlichen Anfangskonzentrationen, aber ansonsten identischen Parametern durchgeführt. Die folgende quantitative Auswertung wird genauso wie in den vorherigen Abschnitten durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.4.4 dargestellt. Man erkennt im Vergleich zu den bisherigen Simulationen (Abb. 3.2.13.b), S. 52, und Abb. 3.2.21.b), S. 59) eine größere Wellenlänge, die eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten zeigt.

Die Wellenlänge λ ergibt in den Simulationen einen niedrigeren Wert als im Experiment. Diese Abweichung von $\approx 16\%$ könnte dadurch bedingt sein, daß das experimentelle System größer ist als die Simulation. Durch die Übereinstimmung der Injektionsdauer wird im Experiment eine höhere Injektionsgeschwindigkeit verwendet, diese könnte zu einer stärkeren Verbreiterung des Konzentrationsprofils führen. Der daraus resultierende geringere Konzentrationsgradient ergäbe damit eine höhere Wellenlänge. Desweiteren erkennt man wie zuvor einen einem Skalengesetz entsprechenden Verlauf. Eine numerische Regression liefert einen Skalenexponenten von $\gamma_\lambda = 0.329 \pm 0.020$; dieser stimmt im Rahmen der Bestimmungsgenauigkeit gut mit dem experimentellen Wert überein.

Die Wachstumszeit T_{em} ergibt in den Simulationen geringfügig höhere Werte. Diese Abweichungen könnten aus einer höheren Rauschamplitude im Experiment resultieren; dies würde zu einer kürzeren Wachstumszeit führen (siehe Seite 41). Experimentell zeigte sich diese Empfindlichkeit gegenüber externen Einflüssen daran, daß durch ein 'normales' Türschließen verursachte Erschütterungen sichtbar waren. Desweiteren können durch die Beleuchtung verursachte thermische Gradienten nicht ausgeschlossen werden. Die im Vergleich zu vorherigen Simulationen (siehe Abb. 3.2.13.a) auf S. 52 und Abb. 3.2.21.a) auf S. 59) größere Wachstumszeit ist dadurch bedingt, daß das anfängliche Rauschen durch die Injektion und die folgende Ausbreitung gedämpft wird. Dies ist bei Simulationen mit einer horizontal homogenen Anfangsverteilung nicht der Fall. Desweiteren erkennt man wie zuvor einen einem

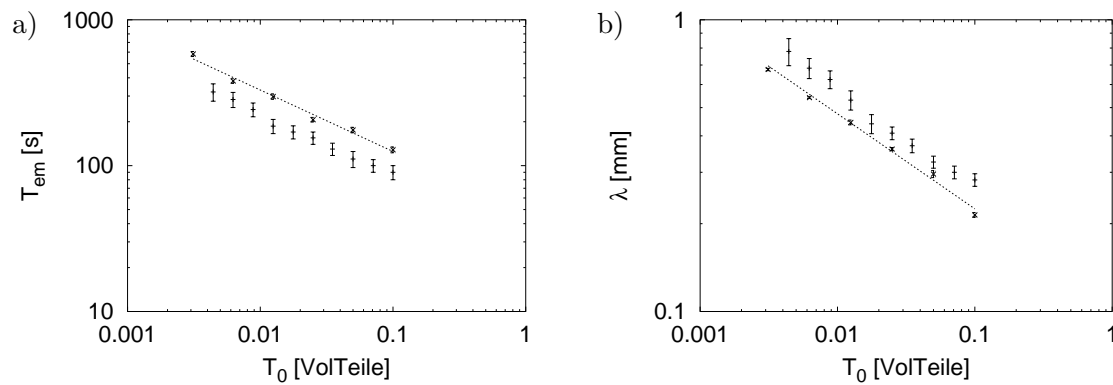


Abbildung 3.4.4: Simulationen mit Injektion (\times), $A_{crit} = 10$ sowie Tensid/Glyzerin System ($+$), $R'_\rho = 1$. a) T_{em} vs T_0 ; b) λ vs T_0 sowie Ausgleichsgeraden (die Parameter können dem Text entnommen werden).

Skalengesetz entsprechenden Verlauf. Eine numerische Regression liefert einen Skalensexponenten von $\gamma_T = -0.432 \pm 0.023$; dieser stimmt im Rahmen der Bestimmungsgenauigkeit mit dem experimentellen Wert überein.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß sowohl die Wellenlänge als auch die Wachstumsdauer quantitativ gut mit den experimentellen Werten übereinstimmen. Dadurch wurde der starke Einfluß der anfänglichen räumlichen Verteilung deutlich.

3.5 Abschließender Vergleich

Eine Übersicht der in dieser Arbeit bestimmten Skalenexponenten für $R'_\rho = 1$ sowie die Werte der Wachstumszeit und Wellenlänge für $T_0 = 0.025$ VolTeile sind in der folgenden Tabelle dargestellt. Die Werte für andere Stabilitätsverhältnisse können den jeweiligen Kapiteln entnommen werden. Die Wachstumszeit und die Wellenlänge für $T_0 = 0.025$ VolTeile werden aus den Ausgleichsgeraden bestimmt; dieser Wert von T_0 wird gewählt, da er in der Mitte des Parameterbereichs von T_0 liegt.

Methode	γ_T	γ_λ	$T_{em}(0.025)$ [s]	$\lambda(0.025)$ [mm]
Theorie				
Stufenförmig	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	—	—
Simulation				
Stufenförmig	-0.676 ± 0.024	-0.325 ± 0.008	136 ± 11	0.150 ± 0.006
Linear	-0.558 ± 0.021	-0.303 ± 0.004	225 ± 17	0.183 ± 0.009
Injektion	-0.432 ± 0.023	-0.329 ± 0.020	224 ± 18	0.353 ± 0.014
Experiment				
Tensid/Glyzerin	-0.423 ± 0.029	-0.337 ± 0.023	153 ± 31	0.422 ± 0.028
Glycerid/Glucose	-0.514 ± 0.028	-0.386 ± 0.017	285 ± 43	0.493 ± 0.039

Erkennbar ist die sehr gute Übereinstimmung der theoretischen Vorhersage für ein anfänglich stufenförmiges Konzentrationsprofil mit der entsprechenden Simulation.

Ein anfänglich lineares Konzentrationsprofil hingegen führt zu einem geringeren Betrag des Skalenexponenten γ_T . Physikalisch unterscheidet sich diese Anfangsbedingung von der stufenförmigen, daß von Beginn an überall in der Mischung die Bedingung für die doppelt-diffusive Finger-Instabilität erfüllt ist. Somit wachsen Strukturen von Beginn an jedem Ort in der Mischung, wohingegen bei einer stufenförmigen Anfangsbedingung diese sich von der Grenzschicht ausgehend vertikal ausbreiten.

Die Simulationen mit Injektion ergeben eine weitere Verringerung des Betrages des Skalenexponenten γ_T , der mit den Experimenten übereinstimmt.

Parallel zu der Verringerung des Skalenexponenten γ_T ist eine Zunahme der Wellenlängen zu beobachten; zwischen dem Experiment und der Simulation mit Injektion ist eine ungefähre Übereinstimmung der Wellenlängen festzustellen. Das Verhalten der Wellenlänge kann durch die jeweiligen Konzentrationsprofile erklärt werden (siehe Abb. 3.4.3, Seite 77).

Bei dem Skalenexponenten der Wellenlänge sind diese Veränderungen nicht in dieser Größe und Systematik zu beobachten.

Die geringeren Skalenexponenten der Wachstumszeit bei nicht stufenförmigen Anfangsbedingungen können durch die Tatsache anschaulich gemacht werden, daß das Wachstum der Strukturen von Beginn an überall in der Mischung stattfindet. Demzufolge müßte in einer

theoretischen Betrachtung dies explizit berücksichtigt werden. Dies erwies sich jedoch analytisch als nicht handhabbar. Tendenziell würde dies jedoch zu einem geringeren Skalenexponenten der Wachstumszeit führen, da die Wachstumsrate von Beginn an einen endlichen Wert proportional zu T_0 hat.

Das zeitliche Verhalten eines nicht stufenförmigen Konzentrationsprofils kann durch folgende Überlegung abgeschätzt werden. Die Konzentration fällt in allen Bereichen nicht verschwindender Konzentration ab. Da Diffusion durch Gradienten getrieben wird, hat diese somit bei allen Höhen von Beginn an einen Einfluß auf die Konzentration. Anschaulich ist dies daran zu erkennen, das die für eine stufenförmige Anfangsbedingung gültige Abschätzung von ΔT (siehe Gl. 3.1.10 auf S. 35 und ihre Motivation) ist diesem Fall nicht angewendet werden kann, sondern ΔT im Laufe der Zeit abnehmen wird. Dies bewirkt einen zeitlich schnelleren Abfall des Gradienten T_z . So würde beispielsweise ein anfänglich δ förmiges Konzentrationsprofil einen Gradienten $T_z \propto T_0 \cdot t^{-1}$ zur Folge haben. Dies ergäbe aufgrund von $\lambda \propto T_z^{-\frac{1}{4}}$ einen zeitlichen Verlauf der Wellenlänge von $\lambda \propto t^{\frac{1}{4}}$. Näherungsweise tritt dies auf in der Simulation mit einem anfänglich linearem Konzentrationsprofil (siehe Abb. 3.2.20.b), Seite 58) und in den Experimenten (siehe Abb. 3.3.3, S. 67). Mit dem experimentell bestimmten Skalenexponenten der Wachstumszeit $\gamma_T = -0.423 \pm 0.023$ ergäbe dies aufgrund von $\lambda \propto T_0^{-\frac{1}{4}} T_{em}^{\frac{1}{4}}$ einen Skalenexponenten für die Wellenlänge von $\gamma_\lambda = -0.356 \pm 0.06$ für das Experiment. Dies stimmt mit den gemessenen Exponenten im Rahmen der Fehlergenauigkeit überein.

Abschließend läßt sich feststellen, daß die theoretischen Überlegungen für ein stufenförmiges Konzentrationsprofil überzeugend von den Simulation mit einem solchen Profil bestätigt wurden. Zum anderen stimmen die Experimente mit den Simulationen mit Injektion quantitativ überein. Bei anfänglich nicht stufenförmigen Konzentrationsprofilen ist eine Veränderung der Skalenexponenten zu beobachten; hierbei ist nur die Richtung der Veränderung erklärbar. In Verbindung mit den Überlegungen zum zeitlichen Verhalten der Wellenlänge auf Seite 63 bedeutet dies, daß eine exakte theoretische Beschreibung dieses Systems eine vollständige Berücksichtigung der Zeit- und Ortsabhängigkeit erfordert. Darüberhinaus ist zu berücksichtigen, daß in dieser Arbeit nur die maximale Wachstumsrate (Gl. 2.1.18, S. 13) in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten

$$\Lambda(T_z(t))$$

und die dazugehörige Wellenlänge verwendet wurde. Positive Wachstumsraten sind hingegen für einen Bereich von Wellenlängen vorhanden [37, 39]. Eine vollständige Beschreibung würde demzufolge die Berücksichtigung der Wellenlängenabhängigkeit der Wachstumsrate erfordern; dies ergäbe

$$\Lambda(T_z(t), k_{xy}(T_z(t)))$$

Durch diesen, im Rahmen dieser Arbeit nicht handhabbaren Ansatz, ergäbe sich dann ein vollständige Beschreibung der Wellenlänge.

4 – Form der Strukturen

In strukturbildenden Systemen der Hydrodynamik treten verschiedene Formen wie Hexagone oder Rollen auf, so z. B. im Rayleigh-Bénard System (siehe [7, 59]). Im Gegensatz dazu wurden in doppelt-diffusiven Systemen ohne externe Einflüsse bisher immer quadratische [39] oder, wie auch in dieser Arbeit, wabenförmige Strukturen gefunden.

Bei der doppelt-diffusiven Konvektion sollten aufgrund theoretischer Vorhersagen [34] bei endlicher Amplitude streifenförmige Strukturen bevorzugt gegenüber Quadraten auftreten. Dies wurde experimentell bisher jedoch nicht bestätigt [39]. Theoretisch und experimentell (anhand des Salz/Zucker Systems) wurden jedoch streifenförmige Strukturen bei einer externen Scherströmung beschrieben [21]; diese traten schon bei kleinen Reynoldszahlen auf. Dies soll in diesem Kapitel anhand von Simulationen und Experimenten untersucht werden. Hierzu werden verschiedenen Konfigurationen verwendet. Zum einen werden Systeme mit einer horizontal homogenen Anfangsbedingung und einer externen Scherströmung untersucht. Die hieraus gewonnen Erkenntnisse werden dann auf Systeme mit einer selbstinduzierten Scherströmung übertragen. Hierbei entstehen streifenförmige Strukturen ohne extern induzierte Strömungen nur aufgrund einer horizontal inhomogenen Anfangsbedingung. Dies erklärt die bisher anderweitig nicht beschriebenen und in [31] entdeckten Strukturen.

4.1 Simulationen mit Strömungen

In diesem Kapitel soll der Einfluß von Strömungen auf die Strukturbildung in doppelt-diffusiven Systemen anhand von Simulationen untersucht werden. Hierzu werden verschiedenen Konfigurationen untersucht. Zum einen werden Systeme mit einer horizontal homogenen Anfangsbedingung und einer externen Scherströmung untersucht. Zum anderen werden Systeme mit einer inhomogenen Anfangsbedingung untersucht; eine globale, d. h. auf der Raumskala des gesamten Systems, Strömung entsteht hierbei durch die gravitationsgetriebene Ausbreitung.

4.1.1 Externe Scherströmung

Das in diesen Simulationen verwendete System hat eine Größe von $(1 \times 1 \times 1)$ mm³. In x und y Richtung werden periodische Randbedingungen simuliert. Der obere und untere Rand des Systems ist geschlossen. Dem oberen Rand wird eine Geschwindigkeit v_S in x -Richtung zugewiesen. Dies führt dazu, daß sich nach einigen Sekunden im gesamten System

eine Strömung in x Richtung einstellt, die von 0 (am Boden) linear zu v_S (an der Decke) ansteigt. Dies entspricht den Erwartungen (siehe z. B. [4], Kap. 4.2, oder [52], Kap. 13.2.1). Aus diesem Grund wird im Folgenden die linear in z Richtung ansteigende Strömung in x Richtung direkt als Anfangsbedingung der folgenden Simulationen verwendet. In der zeitlichen Entwicklung der Simulationen verhält sich das ganze System inklusive Strömung natürlich gemäß der grundsätzlichen verwendeten Gleichungen 2.2.1 (Seite 15). Dies ist zur Entstehung der doppelt-diffusiven Konvektion notwendig. Ein in z Richtung linear ansteigende Strömung in x Richtung ist auch nur im räumlichen Mittel zu beobachten, da das Strömungsfeld der wachsenden Finger die globale Scherströmung lokal überlagert.

Die Mischung ist anfänglich stufenförmig verteilt, wie auf Seite 40 beschrieben. Es wird eine Konzentration von $T_0 = 0.05$ VolTeile und ein Stabilitätsverhältnis von $R'_\rho = 1$ verwendet. Die Mischungshöhe beträgt $H_{TS} = 0.16$ mm und entspricht damit den Simulationen zur Bestimmung der Wellenlänge, Wachstumszeit etc. (siehe Seite 49 ff), ebenso wie alle weiteren Parameter.

In Abb. 4.1.1 ist die zeitliche Entwicklung von Systemen mit unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten dargestellt. Die in der Abbildung angegebene Scherrate $s_r \equiv \langle \frac{\partial \bar{v}_x}{\partial z} \rangle = \frac{v_S}{H_{Sgs}}$

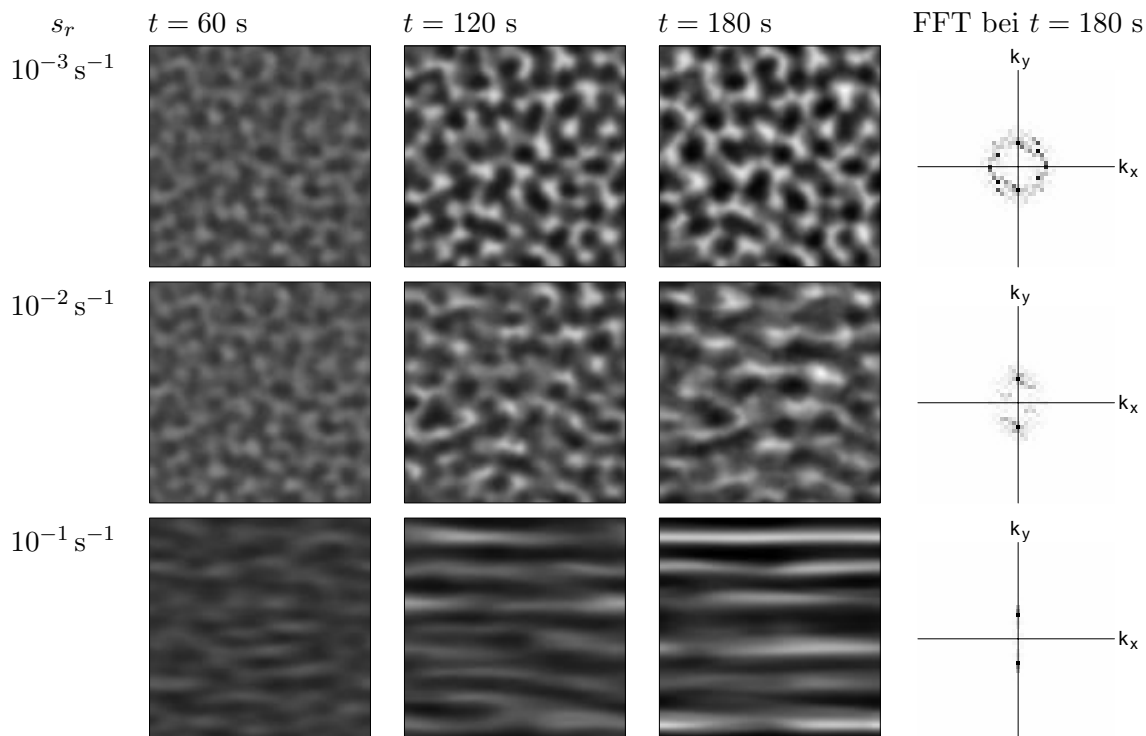


Abbildung 4.1.1: Aufsichten und Fouriertransformierte von Simulation mit einer externen Scherströmung in x -Richtung zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die Strömungsgeschwindigkeit beträgt 0 m/s am Boden ($z = 0$ mm) und 10^{-6} , 10^{-5} und 10^{-4} m/s (in der Abbildung von oben nach unten) an der Decke ($z = 1$ mm).

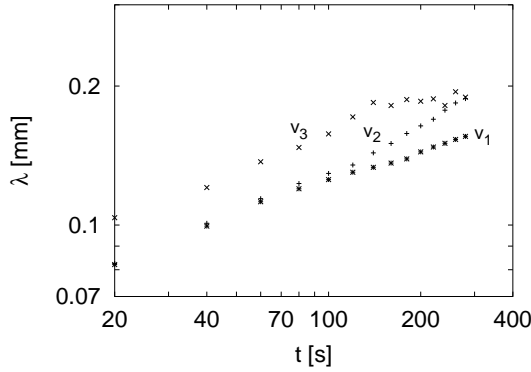


Abbildung 4.1.2: Zeitliche Entwicklung der Wellenlänge für die in Abb. 4.1.1 dargestellten Simulationen mit unterschiedlichen Scherströmungen. $v_1: 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, $v_2: 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, $v_3: 10^{-1} \text{ s}^{-1}$.

ergibt sich aufgrund des linearen Strömungsprofils aus der Strömungsgeschwindigkeit an der Decke v_S und der Höhe $H_{S_{ys}}$ des gesamten Systems. Anhand der Abbildung ist zu erkennen, daß eine Erhöhung der Scherströmung zu einem kontinuierlichen Übergang von einer rein wabenförmigen zu einer streifenförmigen Struktur führt. Zwischen diesen beiden Extremen entstehen anfänglich wabenförmigen Strukturen, die im Laufe der Zeit streifenförmig verzerrt werden. Dieser Übergang ist anhand der Fouriertransformierten in dieser Abbildung zu erkennen. Eine Erhöhung der Scherströmung führt von einer (nahezu) rotationssymmetrischen Fouriertransformierten erwartungsgemäß zu zwei symmetrischen Peaks auf der k_y Achse. Der Abstand dieser Peaks (bei $s_r = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$) vom Mittelpunkt ist größer als der mittlere Radius der ringförmigen Fouriertransformierten (bei $s_r = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$). Beide Effekte sollen im Folgenden näher untersucht werden.

Die zeitliche Entwicklung der Wellenlänge für verschiedene Scherströmungen ist in Abb. 4.1.2 dargestellt. Die Werte für eine Scherrate von $s_r = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ sind minimal größer als die der entsprechenden Simulation ohne Scherströmung (siehe Abb. 3.2.10 auf S. 50); die relative Abweichung beträgt $\mathcal{O}(10^{-3})$. Demgegenüber sind die Wellenlängen für $s_r = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ parallel verschoben in der doppel-logarithmischen Darstellung, für $t \gtrsim 140 \text{ s}$ zeigt sich ein Sättigung. Die größere Wellenlänge der streifenförmigen Struktur ergibt sich aus dem Wellenzahlvektor $k_{xy} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ mit der größten Wachstumsrate. Dieser kann in erster Näherung als unabhängig von der Scherrate angesehen werden. Bei einer wabenförmigen Struktur und einer demzufolge ringförmigen Fouriertransformierten gilt (idealerweise) $k_x = k_y$. Bei einer streifenförmigen Struktur gilt idealerweise $k_x = 0$. Mit $\lambda = 2\pi/k_{xy}$ ergibt sich daraus $\lambda(\text{Streifen})/\lambda(\text{Waben}) = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}/k_x = \sqrt{2}$. Vor Erreichen des Sättigungsbereichs, d. h. bei $t = 140 \text{ s}$, ergibt sich aus den Simulationen ein Verhältnis von $\frac{\lambda(s_r=10^{-1} \text{ s}^{-1})}{\lambda(s_r=10^{-3} \text{ s}^{-1})} \approx 1.381$. Dies stimmt mit den Überlegungen bis auf 2.5% überein. Der Sättigungsbereich der Streifen ergibt sich aufgrund seiner Struktur. Sobald sich überall eine streifenförmige Struktur eingestellt hat, d. h. $k_x = 0$, kann das System seinen gesamten Wellenzahlvektor k_{xy} nur durch Veränderungen von k_y einstellen. Aufgrund der endlichen Breite des Systems ist dieser aber von diskreter Natur $k_y = 2\pi n/L$ (L : Breite, $n \in \mathbb{N}$) und somit nur in Sprüngen zu erreichen, die eine völlige

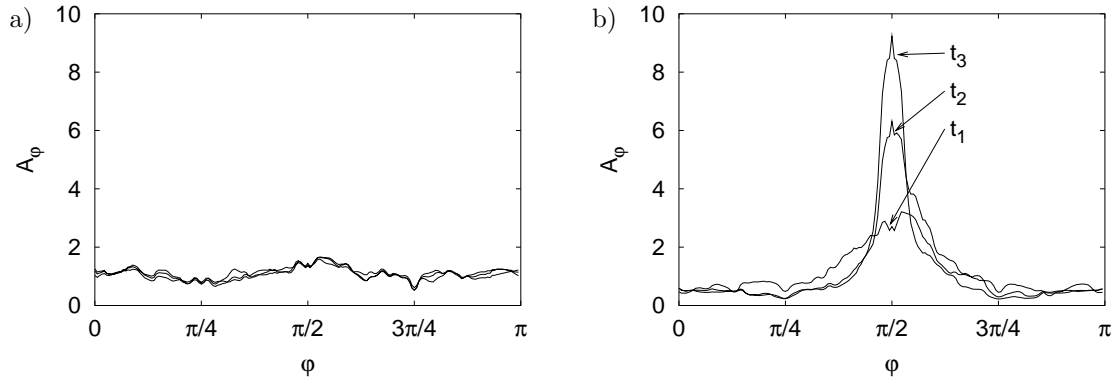


Abbildung 4.1.3: Winkelverteilung der spektralen Amplitude für unterschiedliche Zeitpunkte $t_1 = 60$ s, $t_2 = 120$ s und $t_3 = 180$ s; a) $s_r = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$; b) $s_r = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$.

Umordnung des Systems erfordern würden. Ein System ohne Scherströmung unterliegt dieser Beschränkung nicht, da es aufgrund der fehlenden Orientierung der wabenförmigen Struktur seinen Wellenzahlvektor kontinuierlich an den zeitlich abfallenden Konzentrationsgradienten anpassen kann. Zwischen diesen Extremen beobachtet man ein Verhalten, welches der zuvor beobachteten Verzerrung einer anfänglich wabenförmigen zu einer streifenförmigen Struktur entspricht.

Im Folgenden soll die Form der Strukturen quantifiziert werden. Anhand der Fouriertransformierten in Abb. 4.1.1 ist bei einer steigenden Scherströmung ein Übergang von einer gleichförmigen Winkelverteilung zu einer Bevorzugung eines Winkels in der spektralen Amplitude zu erkennen. Die Winkelverteilung ist in Abb. 4.1.3 dargestellt. Der Winkel φ ist von der positiven k_x -Achse ausgehend gegen den Uhrzeigersinn definiert; aufgrund der Symmetrie der FFT erfolgt die Darstellung in dem Bereich $\varphi \in [0, \pi]$. Die Darstellung ist so normiert, daß der Mittelwert jeder Datenreihe Eins ergibt. Anhand Abb. 4.1.3.a) ist zu erkennen, daß eine Scherrate von $s_r = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ zu einer nahezu gleichförmigen Verteilung der spektralen Amplituden führt. Eine zeitliche Veränderung dieser Verteilung ist nicht zu beobachten. Bei einer Scherrate von $s_r = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ ist hingegen eine deutliche Bevorzugung bestimmter Winkelbereiche zu beobachten, die im Laufe der Zeit zunimmt und sich auf kleinere Bereiche konzentriert.

Diese qualitative Beschreibung soll nun quantitativ erfaßt werden. Hierzu wird eine relative Winkelverteilung $A_{\varphi,rel}$ definiert:

$$A_{\varphi,rel} = \frac{\bar{A}_{\pi/2} - \bar{A}_0}{\bar{A}_{\pi/2} + \bar{A}_0} \quad (4.1.1)$$

Bei der Berechnung dieses Wertes werden die mittleren Amplituden $\bar{A}_{\pi/2}$ und \bar{A}_0 verwendet:

$$\bar{A}_{\pi/2} = \frac{1}{2\Delta\varphi} \int_{\pi/2-\Delta\varphi}^{\pi/2+\Delta\varphi} A_{\varphi} d\varphi \quad \text{und} \quad \bar{A}_0 = \frac{1}{2\Delta\varphi} \int_{-\Delta\varphi}^{+\Delta\varphi} A_{\varphi} d\varphi$$

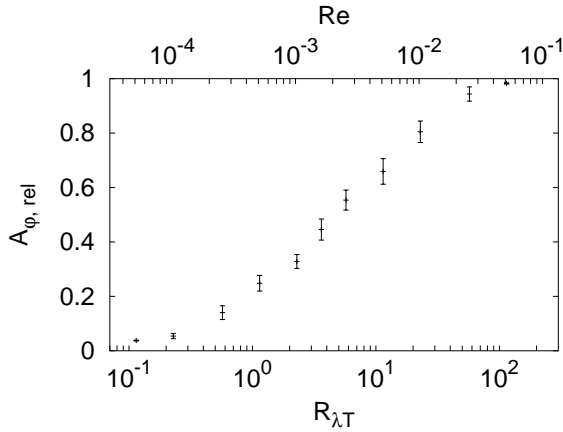


Abbildung 4.1.4: Relative Winkelverteilung der spektralen Amplitude $A_{\varphi,rel}$ für unterschiedliche Scherströmungen v_S dargestellt in dimensionslosen Einheiten von Re bzw. $R_{\lambda T}$ (Definition siehe Text).

Die Mittelung geschieht über einen Bereich mit der Breite $2\Delta\varphi = \pi/3$, dies teilt den gesamten Winkelbereich in drei gleiche Teile. Dieser Wert ist 1 bei einer (idealen) streifenförmigen Struktur parallel ausgerichtet zur x -Achse und 0 bei einer gleichförmigen Winkelverteilung. Anstelle der Scherrate wird dieser Wert in Abhängigkeit von der Reynoldszahl:

$$Re = v_S(H_{TS}) \frac{2H_{TS}}{\nu} \quad (4.1.2)$$

und einer weiteren dimensionslosen Größe

$$R_{\lambda T} = v_S(H_{TS}) \frac{T_{em}}{\lambda} \quad (4.1.3)$$

dargestellt. Die Definition von Re erfolgt dabei wie in [22], hierbei ist H_{TS} die anfängliche Mischungshöhe und $v_S(H_{TS})$ die Geschwindigkeit der Scherströmung in dieser Höhe. Aufgrund der Systemparameter ergibt sich $Re = 5,12 \cdot 10^{-2} s_r$. Die Größe $R_{\lambda T}$ wird eingeführt, um eine anschauliche Interpretation der Ergebnisse anhand der strukturtypischen Längen- und Zeitskalen zu erleichtern. Hierbei sind λ und T_{em} die Wellenlänge und Wachstumszeit des entsprechenden Systems ohne Scherströmung und können an Abb. 3.2.13 (Seite 52) abgelesen werden, hiermit ergibt sich $R_{\lambda T} \approx 1,14 \cdot 10^2 s_r$,

Um die zeitliche Entwicklung der relativen Winkelverteilung zu berücksichtigen, wurde $A_{\varphi,rel}$ in dem Zeitintervall [60, 180] s bestimmt; aus den einzelnen Werte wird ein Mittelwert und die Standardabweichung bestimmt. Das Ergebnis dieser Auswertung für verschiedene Scherraten ist in Abb. 4.1.4 dargestellt. Für die in Abb. 4.1.2 dargestellten Simulationen erhält man Werte von $A_{\varphi,rel} = 0,038 \pm 0,002$ für $s_r = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, $A_{\varphi,rel} = 0,248 \pm 0,029$ für $s_r = 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, sowie $A_{\varphi,rel} = 0,659 \pm 0,047$ für $s_r = 10^{-1} \text{ s}^{-1}$. Anhand der Abbildung 4.1.4 ist zu erkennen, daß eine Erhöhung der Scherrate zu einem kontinuierlichen Übergang zwischen Waben und Streifen führt. Der (nach der hier verwendeten Definition) vollständige Übergang von Waben zu Streifen erfordert eine Erhöhung der Scherrate um drei Größenordnungen. Der in dem Übergangsbereich größere Fehler der Winkelverteilungen spiegelt die zeitliche Veränderung der Winkelverteilung wieder, dies ist an Abb. 4.1.3.b) zu erkennen. Der Übergang findet im

Vergleich zu anderen hydrodynamischen Phänomenen bei kleinen Reynoldszahlen statt. Beispielsweise setzt Turbulenz bei der Umströmung endlicher Körper bei Reynoldszahlen von 10 – 100 (siehe z. B. [19], §26) ein, bei dem Taylor-Couette System tritt Strukturbildung ab einer Reynoldszahl von ≈ 100 auf (siehe z. B. [7]). In dem hier betrachteten System findet der Übergang aufgrund der kleinen Längen- und großen Zeitskala bei kleinen Reynoldszahlen statt. Anschaulich ist dies daran zu erkennen, daß schon eine Scherrate mit der Geschwindigkeit der typischen horizontalen Längenskala (λ) pro Wachstumszeit T_{em} , d. h. $R_{\lambda T} = 1$, ausreicht, um zu einer deutlichen Veränderung der Form der Strukturen zu führen.

4.1.2 Quasi-eindimensionale selbstgenerierte Scherströmung

In dem vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, daß schon geringe Scherraten zu einer deutlichen Formveränderung der Strukturen führen. In diesem Abschnitt wird dieser Aspekt ohne eine externe Scherströmung oder eine Injektion untersucht.

In den bisherigen Simulationen wurden, mit Ausnahme von Kap. 3.4, immer horizontal homogene Anfangsbedingungen verwendet. Im Gegensatz dazu werden in diesem Kapitel Anfangsbedingungen benutzt, die in der horizontalen Ebene inhomogen verteilt sind. Desweiteren werden keine externen Strömungen oder eine Injektion verwendet. Hierzu wird ein System simuliert, das eine Länge von 16 mm (x -Richtung), eine Breite von 1.6 mm (y -Richtung) und eine Höhe von 1.6 mm (z -Richtung) hat. Um diese Größe zu simulieren, wird eine Gitterschrittweite von $\Delta x = 2 \cdot 10^{-2}$ mm verwendet. In x und z -Richtung werden geschlossene, in y -Richtung hingegen werden periodische Randbedingungen verwendet. Die periodischen Randbedingungen werden gewählt, um den bremsenden Einfluß der Wände auf die Strömung zu minimieren. Zu Beginn ist die Mischung dreieckig in der xz Ebene unabhängig von der y Koordinate verteilt; anschaulich entspricht dies einer ‘dachförmigen’ Verteilung. Die Konzentration nimmt linear von 0 an den oberen Kanten des Dreiecks zum Boden hin zu, die maximale Konzentration T_0 wird also am Boden in der Mitte des Dreiecks erreicht. Das Dreieck hat eine Basiskantenlänge von 4.8 mm und eine Höhe von 1 mm. Diese Anfangsbedingung ist anschaulich an Abb. 4.1.5 für $t = 0$ s zu erkennen. Alle weiteren Parameter entsprechen denen der vorherigen Simulationen.

In Abb. 4.1.5 ist die zeitliche Entwicklung des Systems in der Auf- und Seitenansicht dargestellt. Man erkennt, daß sich die Mischung im Laufe der Zeit seitlich, d. h. quasi-eindimensional, ausbreitet. Dies wird durch die höhere Dichte der Mischung gegenüber der Umgebung verursacht. Die maximale Ausbreitung ist durch einen Bereich erhöhter Konzentration gekennzeichnet, der durch ein Einrollen der Mischung gekennzeichnet ist (zu erkennen bei $t = 90$ s und 180 s). Dieses Phänomen ist auch in vielen Alltagssituationen zu beobachten, ein Beispiel wäre ein Tropfen Tinte, der in Wasser zu Boden sinkt. Die Ausbreitung führt zu einer seitlichen Strömung, die aufgrund der Kontinuitätsgleichung zu einer gegensätzlichen Strömung

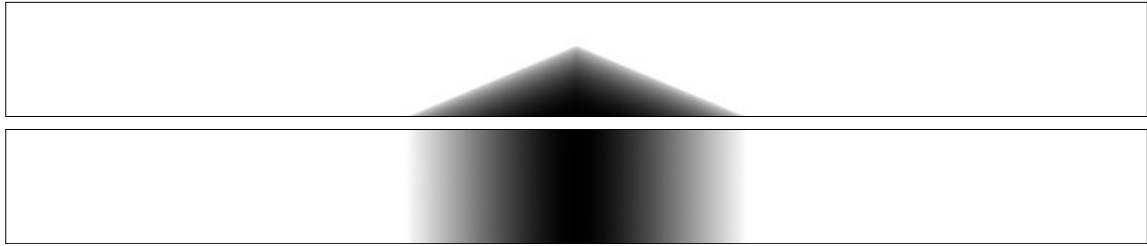
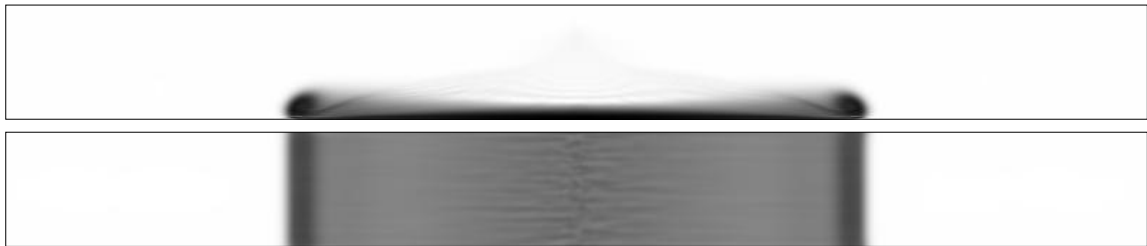
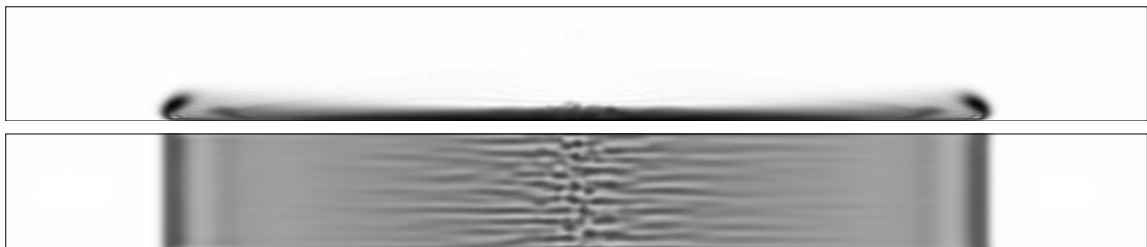
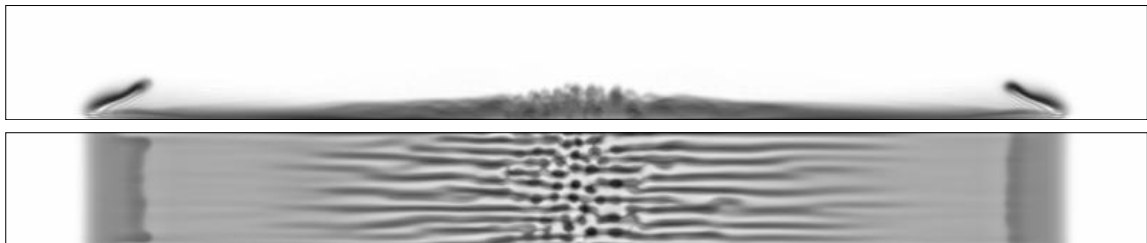
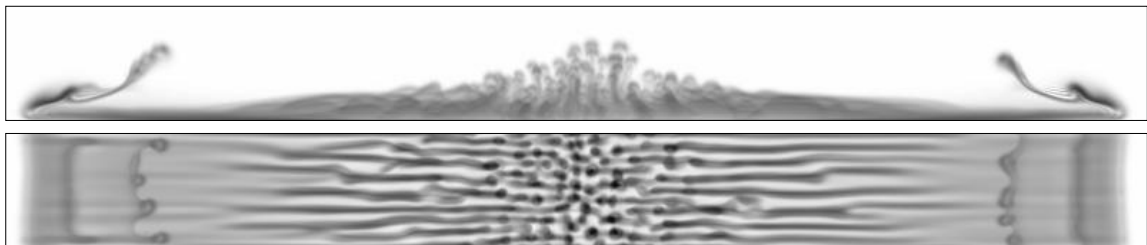
$t = 0 \text{ s}$  $t = 90 \text{ s}$  $t = 180 \text{ s}$  $t = 270 \text{ s}$  $t = 360 \text{ s}$ 

Abbildung 4.1.5: Zeitliche Entwicklung einer Simulation mit einer ‘dachförmigen’ Anfangsbedingung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$. Seitenansichten und Aufsichten.

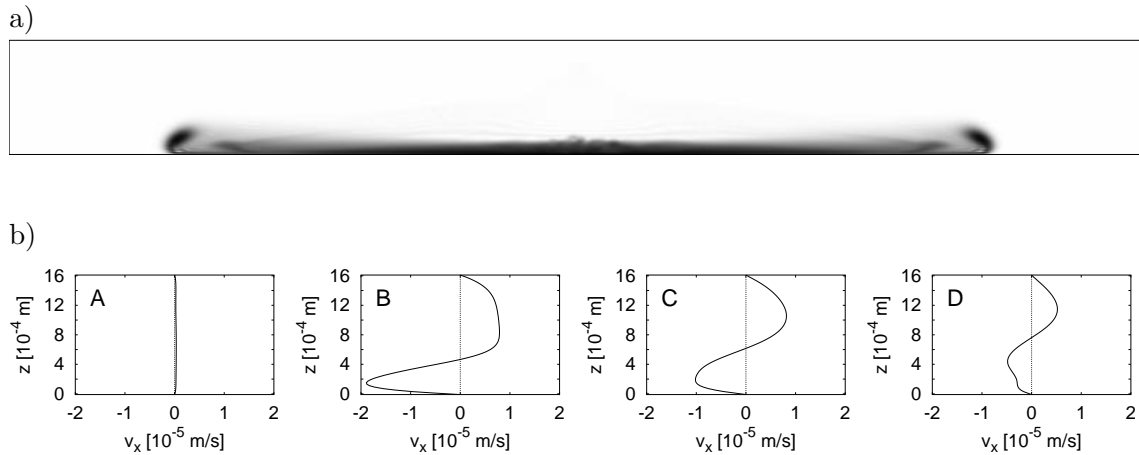


Abbildung 4.1.6: a) Seitenansicht der Simulation aus Abb. 4.1.5 bei $t = 180$ s. b) Höhenabhängigkeit der Strömung in x -Richtung, die Markierungen A – D bezeichnen den Ort der Strömung in a).

im oberen Bereich des Systems führt. Dies ist in Abb. 4.1.6 im Detail dargestellt. Aufgrund der Symmetrie des Systems ist die Strömung in der in Abbildung 4.1.6.b) nicht dargestellten Hälfte des System entgegengesetzt. Das Profil der Strömungen kann durch zwei Parabeln approximiert werden; dieses Strömungsprofil entspricht dem einer druckgetriebenen Strömung (siehe z. B. [4], Kap 4.2). Das System bildet also aufgrund seiner Anfangsbedingung eine Scherströmung aus. Im weiteren Verlauf werden in Abb. 4.1.5 Strukturen erkennbar, wabenförmig in der Mitte und streifenförmig in den seitlichen Bereichen. Die Form der Strukturen ergibt sich aus der jeweiligen seitlichen Strömungen in x Richtung: Diese verschwinden in der Mitte und sind maximal in den seitlichen Bereichen. Somit entsprechen unterschiedliche Bereiche der dargestellten Simulation den unterschiedlichen Randbedingungen der Simulationen aus Abb. 4.1.1 (S. 82). Ein quantitativer Vergleich erscheint als nicht sinnvoll, da in dieser Simulation die Ausbreitung der Mischung zu sich zeitlich und räumlich verändernden Strömungen führt und sich durch diesen Effekt desweiteren das Konzentrationsprofil ändert. Dennoch kann eine Abschätzung erfolgen. Betrachtet man eine Seite des Systems, so bewegt sich der Schwerpunkt innerhalb ≈ 360 s näherungsweise vom Rand einer Hälfte zur Mitte dieser Hälfte, d. h. um ≈ 4 mm. Die Höhe der Mischung beträgt $\mathcal{O}(10^{-4})$ m, damit ergibt sich eine Scherrate der Größenordnung $s_r \approx 1 \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-2}$. Der gleiche Wert ist auch an der Steigung der Kurven in Abb. 4.1.6.B) (bei B und C für $z \lesssim 2 \cdot 10^{-4}$ m) abzulesen. Dieser Wert stimmt mit dem zuvor bestimmtem Wert für Streifenbildung (siehe Abb. 4.1.1 auf S. 82) überein.

Bei dieser Simulation ist in Abb. 4.1.5 zu beobachten, daß die Wellenlänge von der Mitte zum Rand hin leicht zunimmt. Dies ist dadurch bedingt, daß in der Mitte des Systems ein größerer vertikaler Konzentrationsgradient als in den seitlichen Bereichen zu beobachten ist. An Abb. 4.1.5 ist dies bei $t = 180$ s in der Seitenansicht zu erkennen.

Um den Einfluß der Konzentrationen auf das zuvor beschriebene Verhalten zu untersuchen,

wird eine weitere Simulation durchgeführt. In Abb. 4.1.7 ist diese Simulation mit einer höheren T_0 Konzentration, aber ansonsten gleichen Parametern wie Abb. 4.1.5 dargestellt.

Eine qualitative Betrachtung der Deutlichkeit der Strukturen zeigt, daß ein Faktor 2 in den anfänglichen Konzentration bei einem Faktor $\approx \frac{2}{3}$ in den Beobachtungszeitpunkten zu vergleichbaren Deutlichkeiten führt. Eine Interpretation dieser Abschätzung mit einem Skalengesetz ergibt $T_{em} \propto T_0^{\approx -0.58}$. Der Skalenexponent liegt damit in der Nähe der zuvor ermittelten Exponenten γ_T .

Bei dieser Simulation ($T_0 = 0.1$ VolTeile) ist erwartungsgemäß eine kleinere Wellenlänge als in der vorhergehenden Simulation ($T_0 = 0.05$ VolTeile) zu beobachten. Die Wellenlänge wurde in einem Gebiet der halben Systemlänge in der Mitte des Gesamtsystems bestimmt. Für $T_0 = 0.05$ VolTeile ergibt sich zu dem Zeitpunkt 270 s eine Wellenlänge von $\lambda = 0.191 \pm 0.004$ mm; für $T_0 = 0.1$ VolTeile ergibt sich zu dem Zeitpunkt 180 s $\lambda = 0.150 \pm 0.003$ mm. Diese Werte liegen über denen einer anfänglich linearen Konzentration (Abb. 3.2.21 auf S. 59) und unter denen einer Simulation mit Injektion (Abb. 3.4.4 auf S. 78). Eine Interpretation dieser Werte mit einem Skalengesetz ergibt $\lambda \propto T_0^{\approx -0.349}$. Auch dieser Skalenexponent ist mit den zuvor ermittelten γ_λ verträglich.

Anhand der Bilder und den angegebenen Zeitpunkten erkennt man, daß eine höhere Konzentration aufgrund der höheren Dichte und damit größeren Masse zu einer schnelleren Ausbreitung führt. Dies entspricht erwartungsgemäß qualitativ den Ergebnissen des vergleichbaren experimentellen Systems (siehe [31], Kap 4.4.3), ein quantitativer Vergleich ist aufgrund der unterschiedlichen Geometrien und Vorgehensweisen nicht sinnvoll.

Die schnellere Ausbreitung bewirkt eine stärkere Scherströmung, die in Übereinstimmung mit den Ergebnissen des vorherigen Kapitels zu geraderen Strukturen in den seitlichen Bereichen führt.

Bei einem Vergleich der Ausbreitung der Mischung der beiden Simulationen untereinander fällt auf, daß die gleiche Ausbreitung bei einer Verdoppelung der Konzentration $\approx \frac{2}{3}$ der Zeit erfordert. Dies kann durch eine Energiebilanz erklärt werden. Anfänglich besitzt das System die potentielle Energie

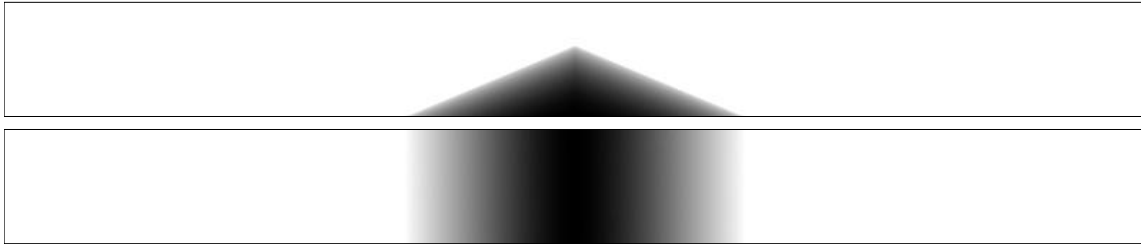
$$E_{pot} = \Delta\rho V_0 g \Delta h \quad (4.1.4)$$

Diese Energie setzt sich aus der höheren Dichte der Mischung $\Delta\rho = (\alpha_T T + \alpha_S S)\rho_{H_2O} = T(\alpha_T + \alpha_S/R'_\rho)\rho_{H_2O}$ (siehe Gl. 2.1.5 auf S. 10), ihrem Volumen V_0 und der Höhendifferenz Δh der Schwerpunkte der anfänglichen gegenüber einer ausgebreiteten Verteilung zusammen. Die potentielle Energie des Wasser bleibt aufgrund dieser Nullpunktswahl unberücksichtigt. Unter Vernachlässigung von Energiedissipation geht diese Energie durch die Ausbreitung in kinetische Energie über

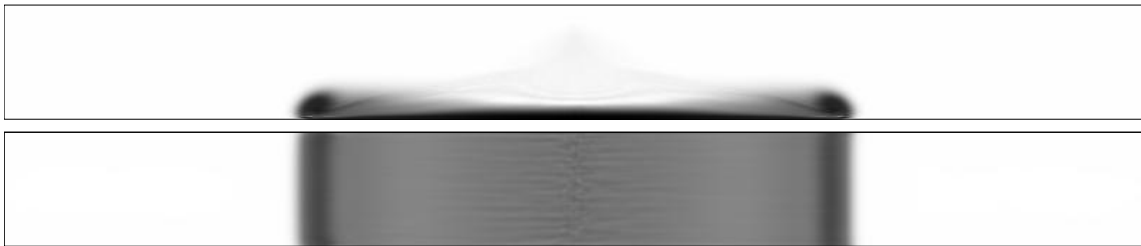
$$E_{kin} = \frac{1}{2}(\rho_{H_2O} V_{H_2O} + \Delta\rho V_0)\bar{v}^2 \quad (4.1.5)$$

Vereinfachend wird eine mittlere Geschwindigkeit \bar{v} angenommen. Hierbei wird die sich bewegende höhere Masse der Mischung $\Delta\rho V_0$ als auch die Masse des gesamten strömenden

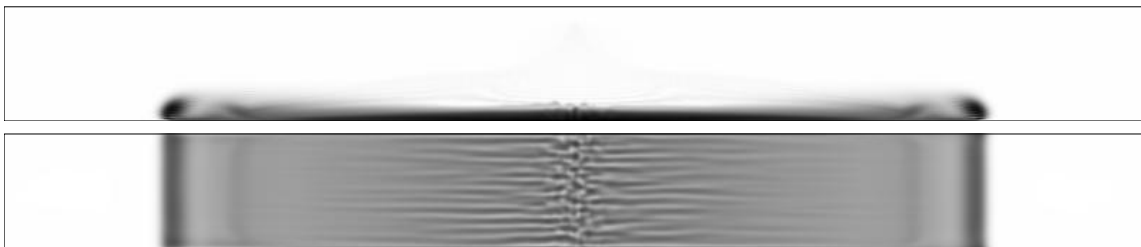
$t = 0 \text{ s}$



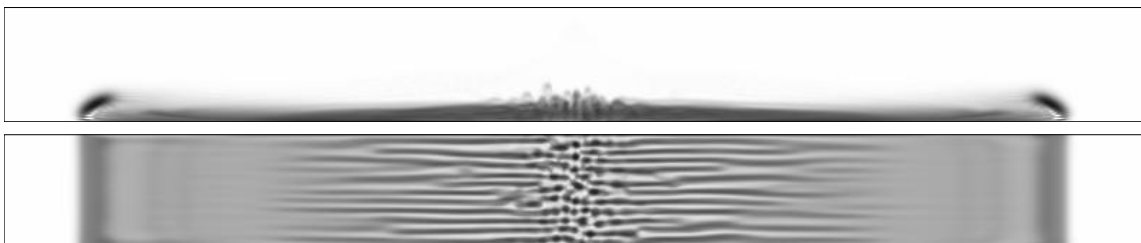
$t = 60 \text{ s}$



$t = 120 \text{ s}$



$t = 180 \text{ s}$



$t = 240 \text{ s}$

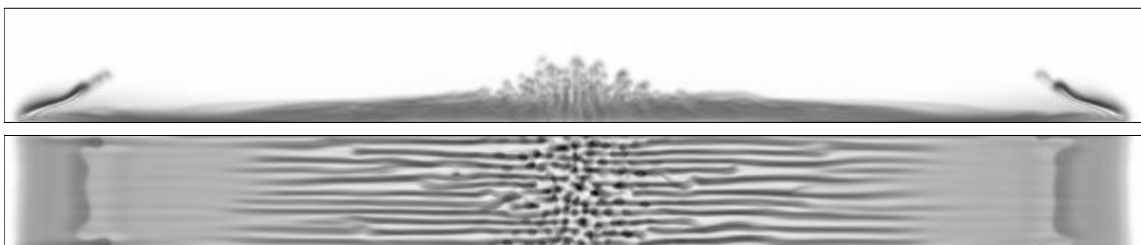


Abbildung 4.1.7: Seitenansichten und Aufsichten der zeitliche Entwicklung einer Simulation mit einer 'dachförmigen' Anfangsbedingung, $T_0 = 0.1 \text{ VolTeile}$, $R'_\rho = 1$. Alle weiteren Parameter des Systems entsprechen der in Abb. 4.1.5 dargestellten Simulation.

Wassers $\rho_{H_2O}V_{H_2O}$ berücksichtigt. Das Volumens des gesamten strömenden Wassers V_{H_2O} ist aufgrund der Gegenströmung in dem oberen Bereich (siehe Abb. 4.1.6.b)) größer als das der Mischung, d. h. $V_{H_2O} > V_0$. Für $T_0 = 0.1$ VolTeile, $R'_\rho = 1$ gilt $\frac{\Delta\rho V_0}{\rho_{H_2O}V_{H_2O}} < 0.021 \ll 1$. Damit ist der Beitrag der höheren Mischungsdichte zur kinetische Energie vernachlässigbar gegenüber der des reinen Wassers und damit gilt

$$E_{kin} \approx \frac{1}{2}\rho_{H_2O}V_{H_2O}\bar{v}^2 \quad (4.1.6)$$

Unter Vernachlässigung von Energiedissipation folgt aus der Energiebilanz $\frac{1}{2}\rho_{H_2O}V_{H_2O}\bar{v}^2 \approx \Delta\rho V_0 g \Delta h$ oder

$$\bar{v} \approx \left(2\frac{\Delta\rho V_0}{\rho_{H_2O}V_{H_2O}}g\Delta h\right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.7)$$

Zwei Simulationen mit unterschiedlicher Konzentration werden zu den Zeitpunkten verglichen, an denen sie die selbe Ausbreitung x haben, d. h. $x = \bar{v}t \stackrel{!}{=} const$. Aufgrund dieser Annahme besitzen sie vergleichbare Δh . Somit gilt $\bar{v}t \propto \Delta\rho^{\frac{1}{2}}t$. Da beide Simulationen das gleiche Stabilitätsverhältnis R'_ρ besitzen, gilt $\Delta\rho \propto T$ (siehe oben). Somit ergibt sich $T^{\frac{1}{2}}t \stackrel{!}{=} const$. Aus dieser Relation ergibt sich eine vergleichbare Ausbreitung für $t \propto T^{-\frac{1}{2}}$. Dies ist mit dem beobachtetem Verhalten verträglich.

Eine exakte Behandlung dieses Problems durch die Anwendung des Lagrangeformalismus mit Gl. 4.1.4, 4.1.6 und $x(t) \propto \frac{1}{\Delta h(t)}$ (aufgrund geometrischer Überlegungen) führt zu einer Differentialgleichung des Typs $\ddot{x}(t) = const \cdot x(t)^{-2}$. Eine analytische Lösung dieser Gleichung erwies sich im Rahmen dieser Arbeit als nicht durchführbar und erschien aufgrund der geringen physikalischen Relevanz als nicht lohnenswert, insbesondere aufgrund der Beschränktheit auf diese spezielle Geometrie. Die numerische Lösung zeigte jedoch approximativ für wachsende t einen linearen Verlauf in $x(t)$ und demzufolge eine konstante Geschwindigkeit. Anschaulich ist dies durch die schnell abnehmende Beschleunigung aufgrund der rasch abnehmenden Höhe zu verstehen. Die approximative Relation $\bar{v} \propto T^{\frac{1}{2}}$ bleibt natürlich bestehen. Somit entspricht dies der zuvor erzielten Näherung.

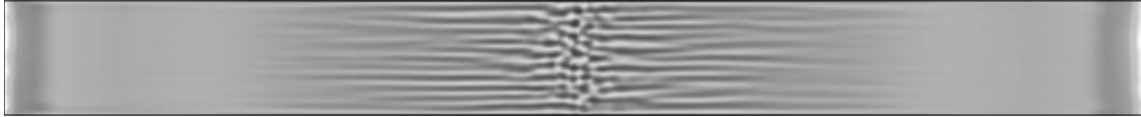
Bei einer Erhöhung des Stabilitätsverhältnis sind die gleichen Strukturen zu beobachten (siehe Abb. 4.1.8). Aufgrund der geringen relativen Dichte der destabilisierenden Substanz hat eine Erhöhung des Stabilitätsverhältnis nur eine geringe Erhöhung der Ausbreitungsgeschwindigkeit zur Folge. Die zuvor schon in den anderen Simulationen auftretende größere Wachstumszeit bei einem höheren Stabilitätsverhältnis (siehe Abb. 3.2.17, S. 55, und Abb. 3.2.23, S. 60) ist auch hier zu beobachten.

Diese bisher erzielten Ergebnisse sind qualitativ nicht von der speziellen Form der Anfangsbedingung abhängig. Variationen der Basiskantenlänge oder Höhe der 'dachförmigen' Anfangsbedingung, sowie Simulationen mit einem mittig angeordneten Block oder mit konstanten Konzentration innerhalb der Mischung führen lediglich zu anderen Strömungsgeschwindigkeiten. Dieser Einfluß wurde schon anhand der unterschiedlichen Konzentrationen verdeutlicht.

$t = 120$ s



$t = 240$ s



$t = 360$ s

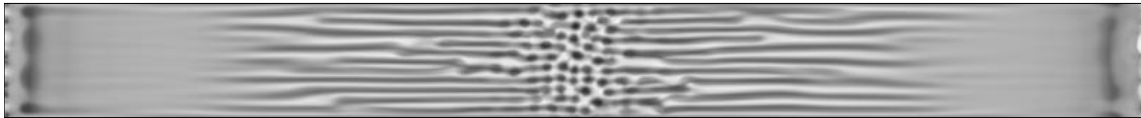


Abbildung 4.1.8: Aufsichten der zeitliche Entwicklung einer Simulation mit einer ‘dachförmigen’ Anfangsbedingung, $T_0 = 0.1$ VolTeile, $R'_\rho = 2$. Alle weiteren Parameter des Systems entsprechen der in Abb. 4.1.5 dargestellten Simulation.

Aus diesem Grund wird auf eine Darstellung von Simulationen mit anderen Anfangsbedingungen verzichtet.

4.1.3 Quasi-zweidimensionale selbstgenerierte Scherströmung

In den bisherigen Simulationen erfolgte bei einer Beobachtung entlang der vertikalen Achse die Ausbreitung der Mischung quasi-eindimensional. Dies ist durch die anfängliche Translationsinvarianz des Systems in y -Richtung bedingt. Diese Einschränkung wird nun fallengelassen, indem ein größeres System mit einer punktsymmetrischen¹ Anfangsbedingung simuliert wird. Wie in den vorherigen Simulationen werden auch bei dieser keine externen Strömungen oder eine Injektion verwendet.

Das simulierte System hat eine Größe von $(11 \times 11 \times 1.6)$ mm³ bei einer Gitterschrittweite von $\Delta x = 2.5 \cdot 10^{-2}$ mm. Dies entspricht $9 \cdot 10^6$ simulierten Kontrollvolumina, wodurch das laufende Simulationsprogramm einen Speicherplatzbedarf von ≈ 1.9 GB hat. Dies stellt das Maximum der temporär zur Verfügung stehenden Rechenleistung dar. Die Mischung ist anfangs in einem mittig liegenden Kegel angeordnet. Die Mischungskonzentration nimmt (wie in den vorherigen Simulationen) linear von der Kegeloberfläche zum Boden zu. Es wird eine Kegelhöhe von 1 mm und ein Basisdurchmesser von 4.8 mm verwendet; diese Werte entsprechen somit den Parameter der vorherigen ‘dachförmigen’ Anfangsbedingung.

¹Die Punktsymmetrie gilt nur unter Vernachlässigung der Ränder des Systems. Kreisförmige Systeme sind mit dem verwendeten numerischen Algorithmus aufgrund der Gittergeometrie nicht realisierbar.

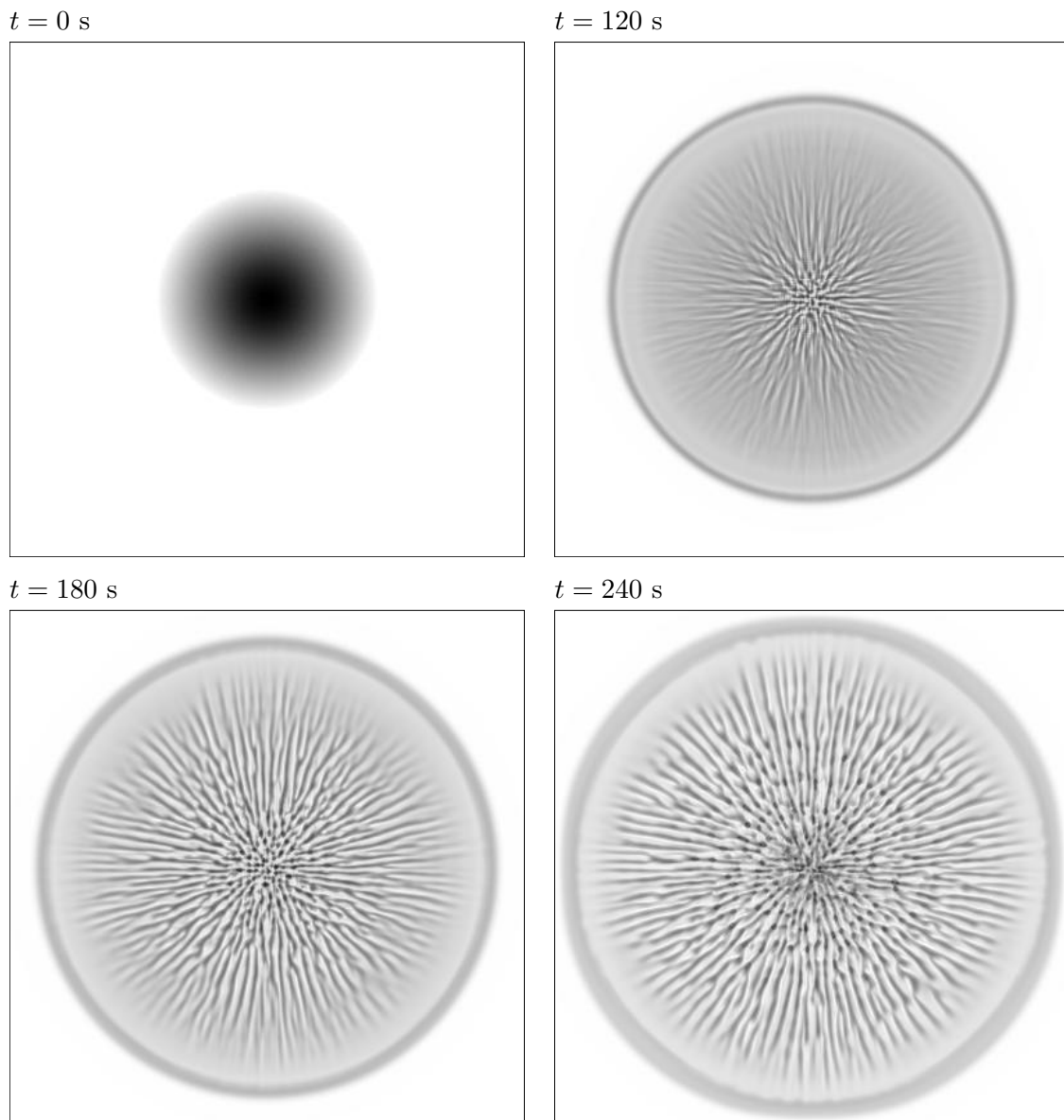


Abbildung 4.1.9: Aufsichten der zeitliche Entwicklung einer Simulation mit einer kegelförmigen Anfangsbedingung, $T = 0.1$ VolTeile, $R'_\rho = 1$, Bildgröße 11×11 mm.

Die Ergebnisse dieser Simulation sind in Abbildung 4.1.9 dargestellt. Erwartungsgemäß ist eine radiale Ausbreitung der Mischung zu beobachten. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist aufgrund der unterschiedlichen Geometrie quantitativ natürlich nicht mit den vorherigen Simulationen vergleichbar. Im Gegensatz zu den vorherigen Simulationen erkennt man einen zeitlichen Abfall der Ausbreitungsgeschwindigkeit, dies ist durch die nun zweidimensionale Ausbreitung der Mischung bedingt.

Im Laufe der Zeit entsteht in der Mitte die wabenförmigen Struktur, die nach außen in eine streifenförmige Struktur übergeht. Die maximale Ausbreitung ist wiederum durch einen

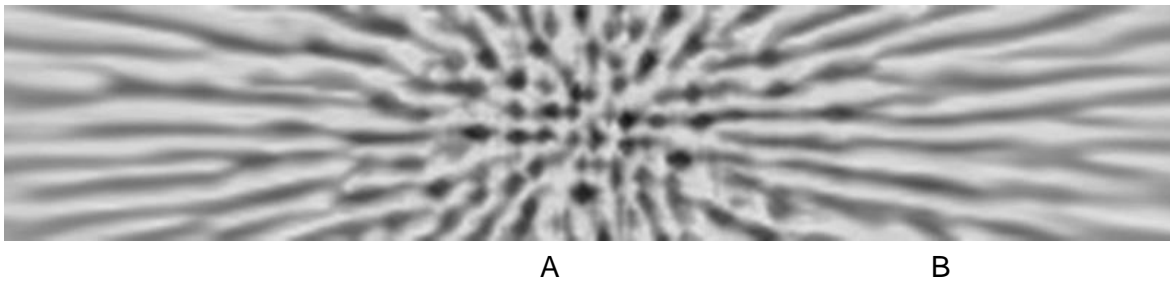


Abbildung 4.1.10: Ausschnittsvergrößerung der in Abb. 4.1.9 dargestellten Simulation bei $t = 180$ s, Bildgröße 6×3 mm.

Bereich mit erhöhter Konzentration gekennzeichnet. Diese Struktur entspricht somit den vorherigen Simulationen und unterscheidet sich auf den ersten Blick nur durch ihre Symmetrie. Dies wird bei einer Ausschnittsvergrößerung (siehe Abb. 4.1.10) anschaulich deutlich.

4.1.4 Entstehung neuer Strukturen

Bei einer detaillierten Betrachtung von Abb. 4.1.9 bei $t = 240$ s oder Abb. 4.1.10 wird deutlich, daß bei zunehmenden Abstand von der Mitte des System weitere Streifen zu beobachten sind. Ebenso wie bei den vorherigen Simulationen (siehe z.B. Abb. 4.1.8) ist zwar eine geringe Zunahme der Wellenlänge bei wachsendem Abstand zur Mitte erkennbar, die auf lokal unterschiedliche Konzentrationsgradienten T_z bei der Entstehung der Strukturen zurückzuführen ist (Abb. 4.1.9 bei $t = 120$ s). Dieser Effekt reicht jedoch aufgrund der schwachen Konzentrationsgradientenabhängigkeit der Wellenlänge ($\lambda \propto T_z^{-1/4}$) nicht aus, die durch die Ausbreitung der Mischung geometrisch bedingte Zunahme des Abstands der Strukturen zu kompensieren. Dies erzwingt die Bildung neuer Strukturen.

Diese können auf zwei unterschiedliche Arten entstehen. Zum einen können diese Streifen in den Zwischenräumen entstehen, dies ist in Abb. 4.1.10 oberhalb der Markierung A zu erkennen; ein deutlicheres Beispiel ist in Abb. 4.1.11.a) dargestellt. Desweiteren können neue Streifen durch die Gabelung bestehender Streifen entstehen, zu erkennen in Abb. 4.1.10 oberhalb der Markierung B. Ein deutlicheres Beispiel ist in Abb. 4.1.11.b) dargestellt.

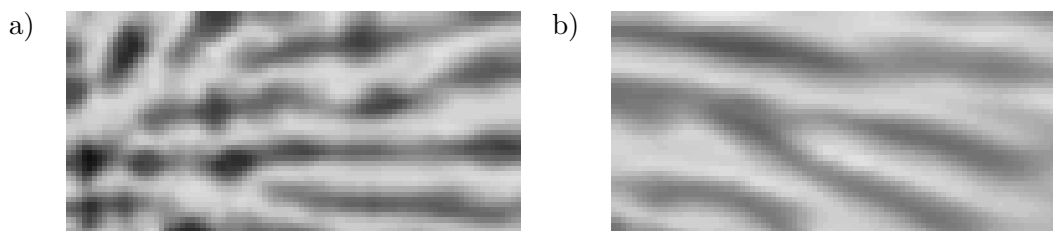


Abbildung 4.1.11: Ausschnittsvergrößerungen der Simulation aus Abb. 4.1.9 bei $t = 180$ s. Anhand der Orientierung der Streifen ist die Lage dieser Ausschnitte zu erkennen, Bildgröße 1.2×0.6 mm.

Diese strukturellen Unterschiede deuten auf unterschiedliche Entstehungsmechanismen hin. Die Entstehung neuer Strukturen in den Zwischenräumen ist primär im inneren Bereich des Systems zu beobachten. Dieser innere Bereich ist zu Beginn der Simulation mit Mischung bedeckt, so daß eine ausreichende Konzentration S zur Bildung neuer Strukturen vorhanden ist. Die Strukturen entstehen somit zu Beginn der Entwicklung.

Verzweigungen sind primär in den äußeren Bereichen zu beobachten. Zum einen befindet sich in Bereichen zwischen den bestehenden Streifen wenig destabilisierende Substanz S , die neue Strukturen bilden könnte. Darüberhinaus neigen in diesem Bereich die Streifen aufgrund der abnehmenden Ausbreitungsgeschwindigkeit zur Instabilität. Dieser Effekt ist anhand von Abbildung 4.1.1 (Seite 82) für $t = 180$ s ersichtlich: In dieser Abbildung sind bei einer Scherrate von 10^{-1} s^{-1} gerade Streifen zu erkennen; eine niedrigere Scherrate (10^{-2} s^{-1}) bewirkt eine laterale Instabilität in Form von periodischen Verdickungen entlang der Streifen. Eine Instabilität in Form einer Verdickung des Streifens dient dann in Abb. 4.1.10 und 4.1.11.b) als Ausgangspunkt für eine Verzweigung.

Die Verzweigung von vertikal wachsenden Fingern wurde in [53] untersucht. In dieser Arbeit wurde nach Entstehung von Salz/Zucker Finger in einer anfänglich geneigten Hele-Shaw Zelle ihr Neigungswinkel erhöht, so daß die effektive Gravitation stieg. Dies bedingt aufgrund von $\lambda \propto [\nu D_T / (g \alpha_T T_z)]^{1/4}$ (Gl. 2.1.17 auf S. 13) eine kleinere Wellenlänge, als die der bestehenden Strukturen. Dies führte zu Verzweigungen in den bestehenden Fingern, die dem hier beobachteten Verzweigungen gleichen. Der Unterschied zu dem hier beschriebenen System besteht in dem Entstehungsmechanismus, da hier die Wellenlänge der bestehenden Strukturen aufgrund der Ausbreitung steigt gegenüber der konzentrationsbedingten. Der zeitliche Abfall des Konzentrationsgradienten reicht aufgrund der schwachen Abhängigkeit $\lambda \propto T_z^{-1/4}$ nicht aus, die Wellenlängenerhöhung aufgrund der Ausbreitung zu kompensieren.

Interessanterweise können beide Entstehungsmechanismen auch bei Systemen ohne eine punktsymmetrische Anfangsbedingung beobachtet werden; dies ist in Abb. 4.1.12 dargestellt. Die Entstehung von Streifen in den Zwischenräumen tritt wesentlich häufiger als eine Verzweigung. Ersteres ist der grundlegende Strukturbildungsmechanismus in der Mitte des System und entspricht somit dem anfänglich punktsymmetrischen System. Die Verzweigung von Streifen

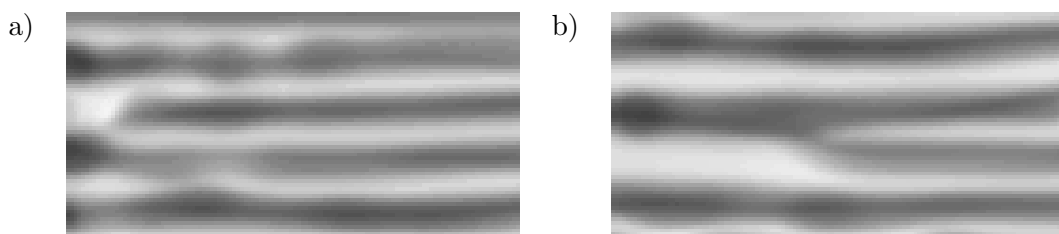


Abbildung 4.1.12: Ausschnittsvergrößerungen der Simulation aus Abb. 4.1.8 (Seite 92) bei $t = 360$ s, beide Ausschnitte liegen rechts der Mitte, Bildgröße 1.2×0.6 mm.

tritt in diesem System selten auf; vermutlich wird sie durch die Umorientierung der gesamten Streifenstruktur (siehe Abb. 4.1.8 auf Seite 92) an diesem Ort verursacht.

In diesem Kapitel wurde gezeigt, daß in einem räumlich inhomogenen System ohne externe Eingriffe eine Vielzahl von unterschiedlichen Strukturen beobachtet werden können. Dies wurde bisher, wenn überhaupt, nur durch verschiedene experimentelle Aufbauten realisiert. Aufgrund dieser Vielfalt wird diese Art von Strukturen nun experimentell mit einer vergleichbaren Anfangsbedingung untersucht.

4.2 Experimente mit Strömungen

Die in dem vorhergehenden Kapitel gewonnenen Erkenntnisse sollen nun anhand von Experimenten verifiziert werden. Aufgrund der experimentellen Einschränkungen und der schon durchgeführten Experimente mit externen Scherströmungen [22] sowie der experimentellen Untersuchungen in [31], werden diese Experimente hier nur in einem begrenzten Umfang durchgeführt.

4.2.1 Externe Scherströmung

Der hierzu verwendete Aufbau ist auf Seite 27 beschrieben. Aufgrund der Größe des Systems und der damit verbundenen Ausbreitung ist die pro Fläche vorhandene Menge an Mischung zeitlich nicht konstant. Dies ist bei einem quantitativen Vergleich mit Simulationen zu berücksichtigen.

Zunächst wird die Strömungsgeschwindigkeit des Wassers in dem Gefäß gemessen; das Ergebnis dieser Messung ist in Abb. 4.2.1 dargestellt. Die Strömung wurde durch die Hinzugabe von Partikeln (Hersteller: Dr. Fr. Schoenfeld GmbH & Co. Düsseldorf, $\varnothing \approx 1\mu\text{m}$) visualisiert. Die Messung der Geschwindigkeit erfolgt durch eine Weg/Zeit Messung. Innerhalb des Beobachtungsfensters ist keine horizontale Veränderung der Strömung festzustellen. Die Bestimmung der Höhe geschieht durch die Fokussierung des Mikroskops. Da das Mikroskop nur in einem begrenzten vertikalen Bereich scharfe Abbildungen liefert und die vertikale Justierung des Objektivs mittels einer Skala geschieht, ist durch eine Eichung der Justierung die Höhenauflösung möglich. Diese Vorgehensweise ist aufgrund der experimentellen Gegebenheiten und der schwierig exakt zu quantifizierenden Bedingung einer ‘scharfen Abbildung’ fehlerbehaftet. Aufgrund der zuvor erwähnten aufbaubedingten Ungenauigkeiten wird dies in Kauf genommen. Durch die so gewonnenen Strömungsgeschwindigkeiten und Höhen kann somit die Scherrate abgeschätzt werden. Unter der Annahme einer vertikal linear zunehmenden Strömung ergibt sich die mittlere Scherrate aus dem Mittelwert und ihr Fehler aus

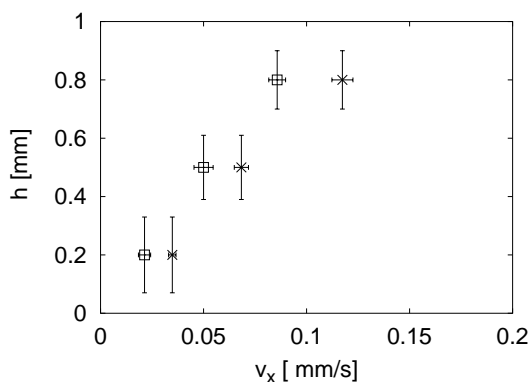


Abbildung 4.2.1: Höhenabhängigkeit der gemessenen Scherströmungsgeschwindigkeit für verschiedene Einstellungen der Pumpe; ‘Geschwindigkeit 1’ (Symbol \square), ‘Geschwindigkeit 2’ (Symbol \times).

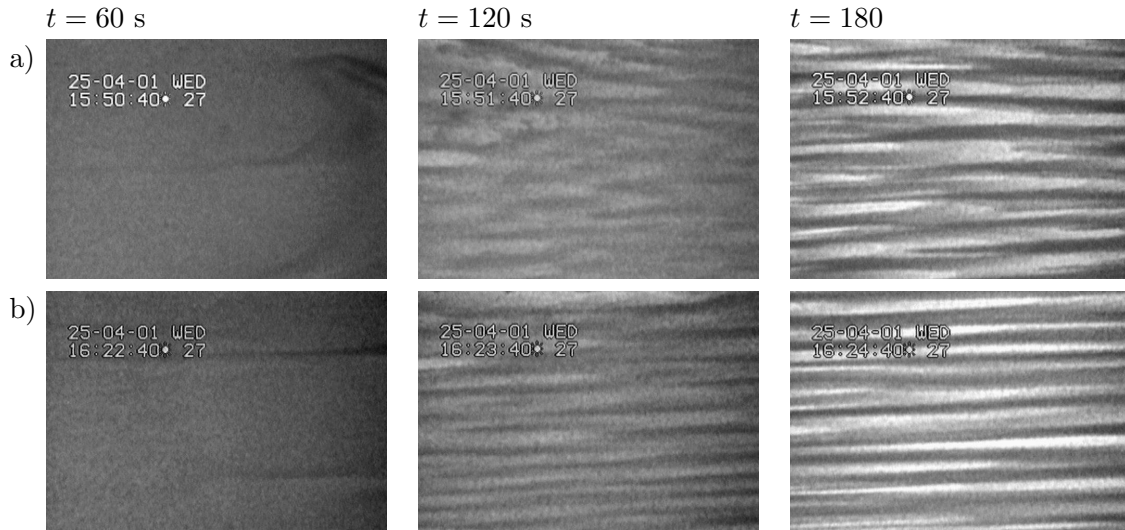


Abbildung 4.2.2: Zeitliche Entwicklung von Experimenten mit externer Scherströmung, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$. a) $s_r = (1.0 \pm 0.2) \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$; b) $s_r = (1.5 \pm 0.4) \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$. Bildgröße $5 \times 3.5 \text{ mm}$.

den individuellen Meßfehlern. Dies liefert für die Einstellung der Pumpe auf ‘Geschwindigkeit 1’ eine Scherrate von $\bar{s}_r = (1.0 \pm 0.2) \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$ und für ‘Geschwindigkeit 2’ den Wert $\bar{s}_r = (1.5 \pm 0.4) \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$.

Mit diesen Scherraten werden nun Experimente durchgeführt, die Vorgehensweise ist auf Seite 27 beschrieben. Die zeitliche Entwicklung für verschiedenen Scherraten ist in Abb. 4.2.2 dargestellt. Analog zu den Simulationen erkennt man die zeitliche Ausbildung einer streifenförmigen Struktur. In Abb. 4.2.2.a) sind noch Ansätze von Waben zu erkennen, die bei einer Erhöhung der Scherrate nicht mehr auftreten (siehe 4.2.2.b)). Dies entspricht qualitativ dem zuvor in den Simulationen beobachteten Verhalten. Darüberhinaus sind die experimentellen Scherraten mit denen der Simulationen im Rahmen der Bestimmungsgenauigkeit verträglich.

Eine Quantifizierung der Formen anhand der Winkelverteilung der Fouriertransformierten unterbleibt aus mehreren Gründen. Zum einen ist eine Variation der Scherrate aufgrund technischer Gegebenheiten nur um eine Größenordnung möglich, die Simulationen ergaben jedoch den vollständigen Übergang über drei Größenordnungen. Desweiteren zeigen die experimentellen Aufnahmen einen Helligkeitsgradienten in x -Richtung; erkennbar in Abb. 4.2.2 für $t = 60 \text{ s}$. Dieses Problem trat auch bei den Experimenten ohne externe Scherströmung auf (siehe Abb. 3.3.2.a) für $t = 60 \text{ s}$ auf Seite 66). Bei der Bestimmung der Wellenlänge einer wabenförmigen Struktur ist dieser Gradient aufgrund der Winkelunabhängigkeit der Fouriertransformierten der wabenförmigen Strukturen unerheblich (siehe Kap. 3.3.1.1 auf S. 65). In dem jetzigen Experiment kann dieses Vorgehen aufgrund der Definition der relativen Winkelverteilung (Gl. 4.1.1 auf S. 84) nicht angewendet werden. Somit unterbleibt eine den Simulationen vergleichbare quantitative Auswertung.

4.2.2 Selbstgenerierte Scherströmung

In diesem Abschnitt soll experimentell untersucht werden, inwieweit streifenförmige Strukturen ohne externe Scherströmungen entstehen können. Bei den Simulationen wurde dies durch eine inhomogene Anfangsbedingung realisiert. Experimentell wird dies umgesetzt, indem die seitliche Ausbreitung der Mischung nicht unterdrückt wird.

Der hierzu verwendete Aufbau ist auf Seite 26 beschrieben. Als Gefäß wird eine Petrischale mit einem Durchmesser von $\varnothing = 7$ cm verwendet. Um eine detaillierte Betrachtung des gesamten System zu ermöglichen, wird eine im Vergleich zu vorherigen Experimenten geringere Injektionsdauer $T_{inj} = 5$ s und damit ein geringeres Injektionsvolumen $V_0 = 12.5 \mu\text{l}$ gewählt, da somit von einer geringeren räumlichen Ausbreitung ausgegangen werden kann. Während der Aufzeichnung des Experiments wird der Objektstisch seitlich bewegt, um das nahezu gesamte System zu erfassen. Die während einer seitlichen Bewegung aufgenommenen Bilder werden manuell zu einem Gesamtbild zusammengestellt. Da der Aufnahmezeitraum (≈ 5 s) klein ist im Vergleich zum Aufnahmezeitpunkt (≈ 180 s) wird die Bewegung der Strukturen während der Aufnahme als vernachlässigbar angesehen. Diese Vorgehensweise ist aufgrund des maximalen Beobachtungsausschnitts des Mikroskops unumgänglich. Eine Beobachtung des System mit einem Markoobjektiv anstelle eines Mikroskops liefert aufgrund des minimalen Beobachtungsausschnitts und der Auflösung der CCD Kamera keine verwendbaren Bilder.

Das Ergebnis dieses Vorgehens ist in Abb. 4.2.3 sowie auf der Titelseite dieser Arbeit dargestellt. In der Mitte des Bildes, dem Ort der Injektion, ist eine wabenförmige Struktur zu erkennen. Seitlich der Mitte werden die an den Vertices der Waben entstehenden Finger aufgrund der Strömung radial nach außen getrieben. Dieser Bereich ist in der Simulation (Abb. 4.1.10 auf S. 94) nicht, oder zumindest nur sehr undeutlich zu erkennen. Dies liegt daran, daß in der Simulation ein kleineres System mit einem kleineren Mischungsvolumen verwendet wurde. Somit findet in der Simulation die Erhöhung der Scherströmung auf kleinerem Raum statt, wodurch der Bereich mit schräg nach außen wachsenden Fingern unterdrückt wird. Weiter außerhalb ist eine rein streifenförmige Struktur zu erkennen. Aufgrund der Symmetrie ist die Gesamtstruktur kreisförmig. Während des Aufnahmezeitpunkts ist keine Beeinflussung

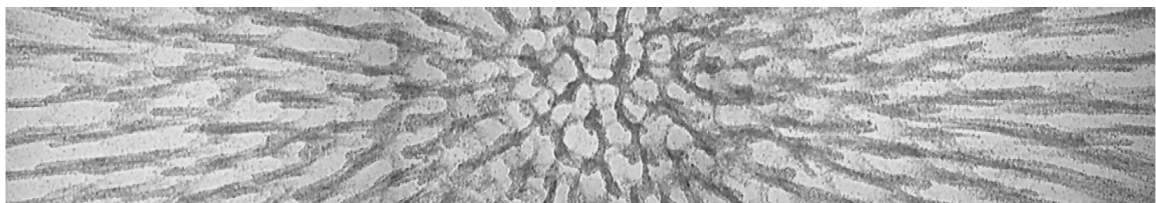


Abbildung 4.2.3: Experiment mit seitlicher Ausbreitung in der Aufsicht. $V_0 = 12.5 \mu\text{l}$, $T_0 = 0.05$ VolTeile, $R'_\rho = 1$. Das Bild ist aus fünf im Zeitraum $t \in [170, 180]$ aufgenommenen Einzelaufnahmen manuell zusammengesetzt, Bildgröße 10×2 mm.

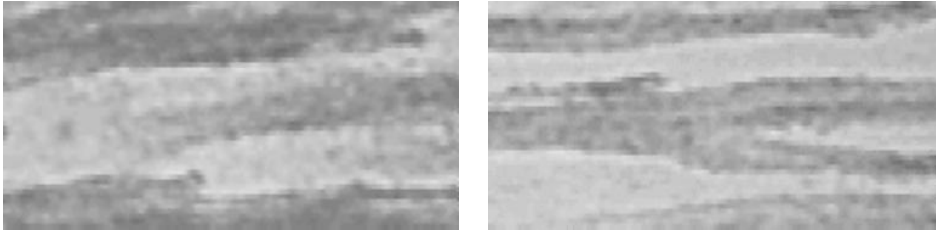


Abbildung 4.2.4: Ausschnittsvergrößerung aus einem Abb. 4.2.3 entsprechenden Experiment, Bildgröße 1.2×0.6 mm.

der Strukturen durch die Gefäßgeometrie zu erkennen. Der Entstehungsmechanismus dieser Struktur entspricht dem der Simulation (Abb. 4.1.9 auf S. 93); insbesondere ein Vergleich mit Abb. 4.1.10 überzeugt.

Darüberhinaus sind die in der Simulation beobachteten Arten der Streifenentstehung (siehe Abb. 4.1.10 und 4.1.11, Seite 94) ebenso im Experiment zu beobachten. Dies ist bei einer genauen Betrachtung von Abb. 4.2.3 zu erkennen und im Detail in Abb. 4.2.4 dargestellt.

Dieses Experiment ermöglicht nur einen qualitativen Vergleich mit der Simulation (siehe Abb. 4.1.10 auf S. 94), da bei der Simulation keine externen Strömungen eingeführt werden. Im Experiment hingegen ist durch die notwendige Injektion der Mischung eine externe, zeitlich begrenzte Strömung vorhanden. Experimente mit einer der Simulation entsprechenden Anfangsbedingung sind prinzipiell nicht zu realisieren. Im Laufe weiterer Experimente stellte sich jedoch heraus, daß die Gesamtstruktur (wabenförmig in der Mitte und seitlich streifenförmig) unabhängig von der Injektionsgeschwindigkeit immer erhalten bleibt. Dies wurde sowohl mit dem bisherigen Aufbau als auch mit einer Injektion von unten (mittels einer speziell angefertigten Petrischale) verifiziert. Darüberhinaus ist diese Gesamtstruktur durch die Simulationen des vorherigen Kapitels bestätigt. Da sich aus diesen Experimenten keine neuen Erkenntnisse gewinnen lassen, wird auf eine Darstellung verzichtet.

Diese Strukturbildung kann auch auf einer größeren räumlichen Skala beobachtet werden, dies wurde erstmalig von [31] beschrieben. Der zeitliche Verlauf eines typischen Experimentes ist in Abbildung 4.2.5 dargestellt. Der in dieser Abbildung für $t = 120$ s schwach erkennbare Ring um die seitlichen Strukturen entspricht dem in den Simulationen beobachteten Bereich der maximalen Ausbreitung mit einer erhöhten Konzentration an destabilisierender Substanz (siehe Abb. 4.1.7 auf S. 90 oder Abb. 4.1.9 auf S. 93). Die Strukturbildung in diesem System mit seitlich streifenförmigen und wabenförmigen Strukturen in der Mitte entspricht in allen Aspekten den zuvor beschriebenen Systemen. Die Waben in der Mitte sind nur aufgrund der großen Ausschnitts nicht zu erkennen.

Die im Vergleich zu dem Experiment in Abb. 4.2.3 (Seite 99) fehlenden Verzweigungen der Finger sind darauf zurückzuführen, das in diesem Experiment ein größeres Mischungsvolumen verwendet wurde. Somit dem System durch die Injektion eine größere Energie zugeführt,

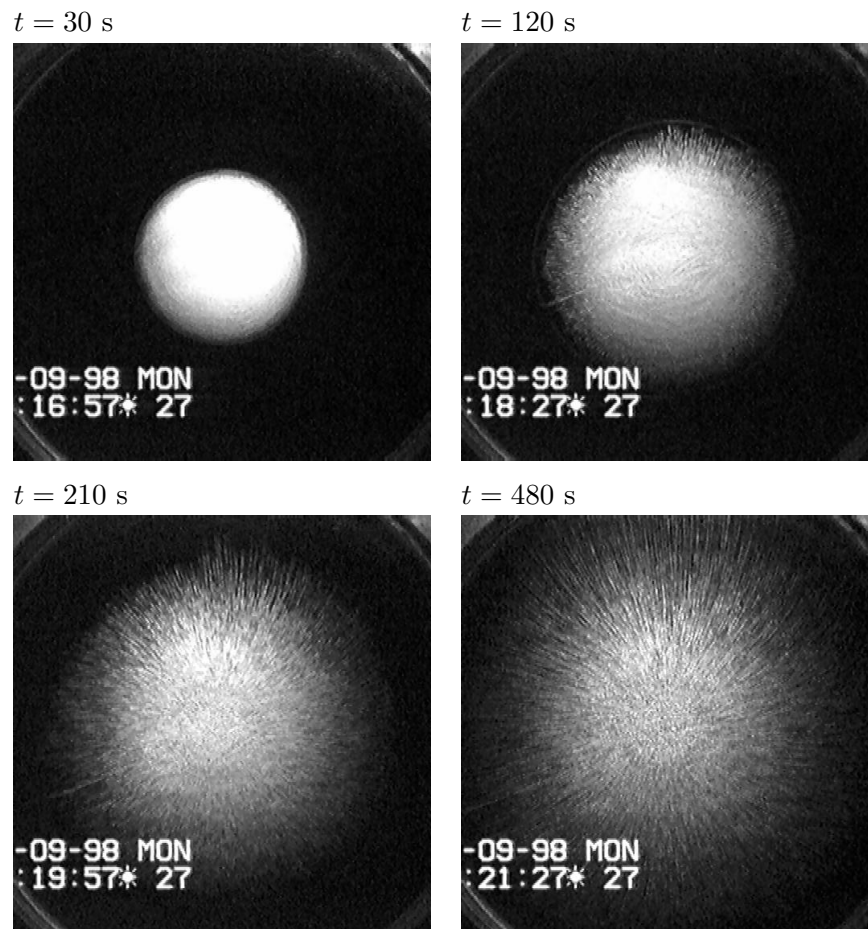


Abbildung 4.2.5: Zeitliche Entwicklung in der Aufsicht eines Experimentes. Ein Mischungstropfen ($V_0 = 50\mu\text{l}$) wird am Boden in der Mitte einer mit Wasser gefüllten Petrischale ($\varnothing = 7\text{ cm}$) injiziert. Die Lichtquelle ist am oberen Bildrand seitlich der Petrischale positioniert; aufgrund von Lichtstreuung erscheinen höhere Konzentrationen an destabilisierender Substanz heller, Bildgröße $5 \times 5\text{ cm}$.

die in Strömung umgesetzt wird. Diese schnellere Strömung bewirkt eine Stabilisierung der streifenförmigen Struktur (siehe Abb. 4.1.1, Seite 82) und wurde schon anhand von Abb. 4.1.7 und 4.1.8 (Seite 92) diskutiert.

Anhand der Abbildung ist zu erkennen, daß sich dieses System gut zur Beobachtung einzelner Finger eignet. Zu diesem Zweck wurde bisher eine Hele-Shaw Zelle [53] verwendet, in der ein aufgrund der Geometrie nahezu zweidimensionales doppelt-diffusives System untersucht wurde. In dem hier betrachteten Fall wird diese Quasi-Zweidimensionalität der Strukturen durch das System selbst erzeugt.

Die in dieser Arbeit beobachteten geraden Finger sind deutlich von denen in den Experimenten in [54] zu unterscheiden. In dieser Arbeit wurde das doppelt-diffusive Salz/Zucker System mit vertikalen Konzentrationsgradienten verwendet. Eine Erhöhung des Stabilitätsverhältnis

fürte zu einem langsameren Wachstum und zu langen und geraden vertikalen Fingern. Dies wurde bei einem hohen Stabilitätsverhältnis R_ρ zwischen 2.5 und 3 beobachtet, daß sich nahe an der Grenze zur Stabilität befand ($R_\rho \lesssim \tau \approx 3$).

Im Gegensatz dazu führen in dieser Arbeit horizontal inhomogene Anfangsbedingungen zu den geraderen Strukturen. Die untersuchten Stabilitätsverhältnisse von $R'_\rho = 1$ und 2, d. h. $R_\rho = 5.2$ und 10.4, sind weit entfernt von der Grenze zur Stabilität bei $\tau \approx 33$. Demzufolge sind bei der hier verwendeten Geometrie diese Strukturen nicht notwendigerweise mit einem langsameren Wachstum verbunden.

Aufgrund der einfachen Durchführbarkeit ist dieses Experiment gut für Demonstrationszwecke geeignet. Darüberhinaus treten in einem einzigen System ohne externe Eingriffe eine Vielzahl von unterschiedlichen Strukturen auf. Wenn überhaupt, so war dies bisher nur durch verschiedene experimentelle Aufbauten realisierbar.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die doppelt-diffusive Konvektion anhand von theoretischen Überlegungen, Experimenten mit einem Tensid/Glyzerin System und Computersimulationen der Navier-Stokes Gleichungen untersucht. Die Untersuchungen befaßten sich mit der Wellenlänge und Form der dabei auftretenden Strukturen.

Die bisherigen theoretischen Modelle der Wellenlänge basierten unter Vernachlässigung einer Zeitabhängigkeit auf den Konzentrationsgradienten. Dieses Modell konnte durch eine Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit erweitert werden, so daß der bisherige Parameter des Konzentrationsgradienten durch die anfängliche Konzentration ersetzt wurde. Weiterhin wurde die Wachstumszeit als eine neue Meßgröße eingeführt. Für ein stufenförmigen Konzentrationsprofil wurden quantitative Voraussagen zum Skalenverhalten der Wachstumszeit und der Wellenlänge getroffen.

Diese Voraussagen konnten anhand von Computersimulationen bestätigt werden. Darüber hinaus wurden Simulationen mit Anfangsbedingungen durchgeführt, die theoretisch nicht untersucht wurden. Hierbei ergaben sich Veränderungen im Skalenverhalten, die theoretisch begründbar waren.

Die Wellenlänge und die Wachstumszeit wurden weiterhin in Experimenten mit einem Tensid/Glyzerin System untersucht. Diese Messungen zeigten eine quantitative Übereinstimmung zu den Computersimulationen.

Die Form der Strukturen wurde anhand von Experimenten und Computersimulationen untersucht. Basierend auf den bisherigen Arbeiten wurden Simulationen mit einer externen Scherströmung durchgeführt. Hierbei zeigte sich ein Übergang von einer waben- zu einer streifenförmigen Struktur. Dieses Phänomen konnte in weiteren Simulationen ohne externe Einflüsse nur durch die Form der Anfangsbedingung erzielt werden. Dabei traten erstmalig verschiedene Strukturen in nur einem System auf. Darüber hinaus wurden in diesem System neue Mechanismen der Strukturentstehung entdeckt.

Diese Strukturen und ihre Entstehungsmechanismen konnten experimentell in allen Punkten bestätigt werden. Damit gelang eine vollständige Erklärung der von Prof. Markus, Max-Planck Institut Dortmund, ursprünglich bei Kaffeeweisser entdeckten Strukturen.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Prof. Dr. Mario Markus (Max-Planck-Institut für molekulare Physiologie, Dortmund) für die effektive und freundliche Unterstützung meiner Arbeit sowie für anregende Diskussionen bedanken.

Außerdem danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Finanzierung dieser Arbeit (Projekt 629/5).

Prof. Winter (Fachbereich Physikalische Chemie, Universität Dortmund) danke ich für die Durchführung der Röntgenkleinwinkelstreuung und die Abschätzung des Diffusionskoeffizienten des Tensids; Prof. Turek (Fachbereich Angewandte Mathematik, Universität Dortmund) für die Diskussion über die numerischen Algorithmen und Prof. Strauß (Fachbereich Chemie-technik, Universität Dortmund) für anregende Diskussionen.

Darüberhinaus gilt mein Dank Matthias Woltering, Malte Schmick und Axel Gruhn (Max-Planck Institut für molekulare Physiologie, Dortmund) für ihre wissenschaftliche, technische und freundschaftliche Unterstützung.

Nicht zuletzt gilt meine Dank meiner Familie und meinen Freunden für ihre Unterstützung und ihre Geduld.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Agarwal: Will saudi arabia drink icebergs? *New Scientist* **75**, 11–13, 1977.
- [2] J. Argyris, G. Faust und M. Haase: *Die Erforschung des Chaos*. Vieweg, 1995.
- [3] P. G. Baines und A. E. Gill: Oh thermohaline convection with linear gradients. *Journal of Fluid Mechanics* **37**, 289–306, 1969.
- [4] G. K. Batchelor: *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 1970.
- [5] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew: *Taschenbuch der Mathematik*. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, 1991.
- [6] C. F. Chen und D. H. Johnson: Double-diffusive convection: A report on an engineering foundation conference. *Journal of Fluid Mechanics* **138**, 405–416, 1984.
- [7] M. C. Cross und P. C. Hohenberg: Pattern formation outside of equilibrium. *Reviews of Modern Physics* **65**(3), 851–1112, 1993.
- [8] J. H. Ferziger und M. Perić: *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 1997.
- [9] S. Finke: *Versuchanleitungen zum Anfänger–Praktikum in Physik*. Universität Dortmund, 1993.
- [10] R. W. Griffiths: The influence of a third diffusing component upon the onset of convection. *Journal of Fluid Mechanics* **92**, 659–670, 1979.
- [11] D. Hebert: Physical oceanography demo movies, University of Rhode Island. <http://www.po.gso.uri.edu/demos/>, 2001.
- [12] J. Y. Holyer: On the collective instability of salt fingers. *Journal of Fluid Mechanics* **110**, 195–207, 1981.
- [13] J. Y. Holyer: The stability of long steady three-dimensional salt fingers to long-wavelength perturbations. *Journal of Fluid Mechanics* **156**, 495–503, 1985.
- [14] H. E. Huppert: Icebergs: technology for the future. *Nature* **285**, 67–68, 1980.
- [15] H. E. Huppert und P. C. Manins: Limiting conditions for salt-fingering at an interface. *Deep-Sea Research* **20**, 315–323, 1973.
- [16] H. E. Huppert und J. S. Turner: Double-diffusive convection. *Journal of Fluid Mechanics* **106**, 299–329, 1981.

- [17] K. Kötter und M. Markus: Die Salzfinger von Gibraltar auf dem Labortisch. *Uni-Report* **30**, 54 – 55, 2000.
- [18] K. Kötter und M. Markus: Double-diffusive fingering instability of a surfactant-glycerine-water drop in water. *Europhysics Letters* **55**(6), 807 – 813, 2001.
- [19] L. Landau und E. M. Lifschitz: *Hydrodynamik*. Akademie Verlag, 1986.
- [20] P. F. Linden: On the structure of salt fingers. *Deep-Sea Research* **20**, 325–340, 1973.
- [21] P. F. Linden: A note on the transport across a diffusive interface. *Deep-Sea Research* **21**(4), 283–287, 1974.
- [22] P. F. Linden: Salt fingers in a steady shear flow. *Geophysical Fluid Dynamics* **6**, 1–7, 1974.
- [23] P. F. Linden und T. G. L. Shirtcliffe: The diffusive interface in double-diffusive convection. *Journal of Fluid Mechanics* **87**, 417–432, 1978.
- [24] M. Markus: *Skript zur Vorlesung 'Chaos'*. Universität Dortmund, 1995.
- [25] M. Markus und K. Kötter: Of icebergs and coffee creamers... *Education in Chemistry* **38**(4), 108, 2001.
- [26] M. Markus und J. Tamames: Fat fractals in Lyapunov space. In: *Fractal Horizons*, herausgegeben von C. A. Pickover, St. Martin's Press, 1996.
- [27] T. J. McDougall: Double-diffusive convection caused by coupled molecular diffusion. *Journal of Fluid Mechanics* **126**, 379–397, 1983.
- [28] T. J. McDougall und J. R. Taylor: Flux measurements across a finger interface at low values of the stability ratio. *Journal of marine research* **42**, 1–14, 1984.
- [29] T. J. McDougall und J. S. Turner: Influence of cross-diffusion on 'finger' double-diffusive convection. *Nature* **299**, 812–814, 1982.
- [30] D.J. Mitchell, G. J. T Tiddy, L. Waring, T. Bostock und M. P. McDonald: Phase-behavior of polyoxyethylene surfactants with water - mesophase structures and partial miscibility (cloud points). *Journal of the Chemical Society – Faraday Transactions I* **79**, 975–1000, 1983.
- [31] F. Niese: *Aggregationsprozesse amphiphiler Substanzen in wäßriger Lösung*. Diplomarbeit, Universität Dortmund, 1997.
- [32] M. R. Porter: *Handbook of Surfactants*. Blackie Academic & Professional, 1994.

- [33] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1992.
- [34] M. R. E. Proctor und J. Y. Holyer: Planform selection in salt fingers. *Journal of Fluid Mechanics* **168**, 241–253, 1986.
- [35] T. Radko und M. E. Stern: Salt fingers in three dimensions. *Journal of Marine Research* **57**, 471–502, 1999.
- [36] T. Radko und M. E. Stern: Finite-amplitude salt fingers in a vertically bounded layer. *Journal of Fluid Mechanics* **425**, 133–160, 2000.
- [37] R. W. Schmitt: The growth rate of super-critical salt fingers. *Deep-Sea Research* **26**(1), 23–40, 1979.
- [38] R. W. Schmitt: The characteristics of salt fingers in a variety of fluid systems, including stellar interiors, liquid metals, oceans, and magmas. *Physics of Fluids* **26**(9), 2373–2377, 1983.
- [39] R. W. Schmitt: Double diffusion in oceanography. *Annual Review of Fluid Mechanics* **26**, 255–285, 1994.
- [40] R. W. Jr. Schmitt: Flux measurements on salt fingers at an interface. *Journal of Marine Research* **37**(3), 419–436, 1979.
- [41] R. W. Jr. Schmitt: The growth rate of super-critical salt fingers. *Deep-Sea Research Part I-Oceanographic Research Papers* **26**(1A), 23–40, 1979.
- [42] C. Y. Shen: The evolution of the double-diffusive instability: salt fingers. *Physics of Fluids A-Fluid Dynamics* **1**(5), 829–844, 1989.
- [43] C. Y. Shen: Heat-salt finger fluxes across a density interface. *Physics of Fluids A-Fluid Dynamics* **5**(11), 2633–2643, 1993.
- [44] C. Y. Shen: Equilibrium salt-fingering convection. *Physics of Fluids* **7**(4), 706–717, 1995.
- [45] C. Y. Shen und G. Veronis: Scale transition of double-diffusive finger cells. *Physics of Fluids A-Fluid Dynamics* **3**(1), 58–68, 1991.
- [46] C. Y. Shen und G. Veronis: Numerical simulation of two-dimensional salt fingers. *Journal of Geophysical Research* **102**(C10), 23131–23143, 1997.
- [47] T. G. L. Shirtcliffe: Transport and profile measurements of the diffusive interface in double diffusive convection with similar diffusivities. *Journal of Fluid Mechanics* **57**(1), 27–43, 1973.

- [48] T. G. L. Shirtcliffe und J. S. Turner: Observations of the cell structure of salt fingers. *Journal of Fluid Mechanics* **41**, 707–719, 1970.
- [49] M. E. Stern: The “salt–fountain” and thermohaline convection. *Tellus* **XII**(2), 172–175, 1960.
- [50] M. E. Stern: Collective instability of salt fingers. *Journal of Fluid Mechanics* **35**, 209–218, 1969.
- [51] H. Stommel, A. B. Arons und D. Blanchard: An oceanographical curiosity: the perpetual salt fountain. *Deep Sea Research* **3**, 152–153, 1956.
- [52] K. Strauß: *Strömungsmechanik*. VCH Verlagsgesellschaft, 1991.
- [53] J. Taylor und G. Veronis: Experiments on salt fingers in a Hele-Shaw cell. *Science* **231**, 39–41, 1986.
- [54] J. R. Taylor und G. Veronis: Experiments on double-diffusive sugar-salt fingers at high stability ratio. *Journal of Fluid Mechanics* **321**, 315–333, 1996.
- [55] J. S. Turner: Salt fingers across a density interface. *Deep-Sea Research* **14**, 599–611, 1967.
- [56] J. S. Turner: Double-diffusive phenomena. *Annual Review of Fluid Mechanics* **6**, 37–56, 1974.
- [57] J. S. Turner: Multicomponent convection. *Annual Review of Fluid Mechanics* **17**(9), 11–44, 1985.
- [58] H. Vogel: *Gerthsen Physik*. Springer, 1999.
- [59] D. Walgraef: *Spatio–Temporal Pattern Formation*. Springer, 1997.
- [60] A. J. Williams: Salt fingers observed in the mediterranean outflow. *Science* **185**, 941–943, 1974.
- [61] R. Winter und F. Noll: *Methoden der biophysikalischen Chemie*. Teubner, 1998.
- [62] Y. Young und R. Rosner: Numerical simulation of double-diffusive convection in a rectangular box. *Physical Review E* **61**(3), 2676–2694, 1998.